

**UNIVERSIDADE PRESBITERIANA MACKENZIE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA ELÉTRICA E COMPUTAÇÃO**

THIAGO DE MATTOS

**BUSCA EVOLUTIVA POR REDES BOOLEANAS NA
TAREFA DE CLASSIFICAÇÃO DE DENSIDADE**

São Paulo
2018

THIAGO DE MATTOS

**BUSCA EVOLUTIVA POR REDES BOOLEANAS NA
TAREFA DE CLASSIFICAÇÃO DE DENSIDADE**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Computação da Universidade Presbiteriana Mackenzie como requisito à obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica e Computação.

Orientador: Prof. Dr. Pedro Paulo Balbi de Oliveira

São Paulo
2018

M435b

Mattos, Thiago de

Busca evolutiva por redes booleanas na tarefa de classificação de densidade. / Thiago de Mattos - São Paulo, 2018.

95 f.: il.; 30 cm.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica e Computação) - Universidade Presbiteriana Mackenzie - São Paulo, 2018.

Orientador: Pedro Paulo Balbi de Oliveira.

Bibliografia: f. 93-95.

1. Redes booleanas. 2. Autômatos celulares. 3. Classificação de densidade. 4. Computação evolutiva. I. Oliveira, Pedro Paulo Balbi de, orientador. II. Título.

CDD 511.324

Bibliotecária Responsável: Marta Luciane Toyoda - CRB 8/ 8234


THIAGO DE MATTOS

BUSCA EVOLUTIVA POR REDES BOOLEANAS NA
TAREFA DE CLASSIFICAÇÃO DE DENSIDADE


Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Computação da Universidade Presbiteriana Mackenzie, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica e Computação.

Aprovado em 02 de Maio de 2018.


BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Pedro Paulo Balbi de Oliveira
Universidade Presbiteriana Mackenzie



Prof. Dr. Eurico Luiz Prospero Ruivo
Universidade Presbiteriana Mackenzie



Prof. Dr. Gonzalo Andrés Heredia Ruz
Universidad Adolfo Ibañez (Santiago, Chile)

A Deus, meu guia e apoio; aos meus pais, que não mediram esforços para me educar e me formar como pessoa; à minha querida e amada Jemima, pela compreensão, paciência e incentivo durante todo o mestrado e desenvolvimento dessa dissertação.

Agradecimentos

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Computação (PPGEEC) da Universidade Presbiteriana Mackenzie e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela bolsa integral de mestrado concedida a partir de Agosto de 2017.

Aos meus pais pelo carinho, apoio e dedicação na minha formação; e a todos aqueles que de alguma forma contribuíram para a conclusão do mestrado, e em especial ao meu orientador, Prof. Dr. Pedro Paulo Balbi de Oliveira, pelo voto de confiança e apoio desde a entrevista do mestrado até o presente momento.

“Nada é mais repugnante do que a maioria, pois ela compõe-se de uns poucos antecessores enérgicos; velhacos que se acomodam; de fracos, que se assimilam, e da massa que vai atrás de rastros, sem nem de longe saber o que quer.”

“Nothing is more disgusting than the majority: because it consists of a few powerful predecessors, of rogues who adapt themselves, of weak who assimilate themselves, and the masses who imitate without knowing at all what they want.”

“Nichts ist widerwärtiger als die Majorität; denn sie besteht aus wenigen kräftigen Vorgängern, aus Schelmen, die sich anpassen, aus Schwachen, die sich angleichen, und der Masse, die nachtrollt, ohne im mindesten zu wissen, was sie will.”

Johann Wolfgang von Goethe

RESUMO

Redes Booleanas são compostas por nós que representam variáveis binárias computadas em função dos valores representados por nós adjacentes. Esta computação local leva a comportamentos globais, como a convergência para um estado fixo da rede. Tal comportamento é utilizado na tarefa de classificação de densidade, onde procura-se a convergência dos valores de todos os nós para um ponto fixo que reflete o estado predominante presente na configuração inicial da rede, ou seja, um objetivo global restrito a ações de caráter local. Neste trabalho são efetuadas buscas evolutivas de modo a encontrar regras e topologias de redes Booleanas com boa performance na classificação de densidade. Consideram-se exclusivamente vizinhanças irregulares e bidirecionais para todos os nós, representando inicialmente a função Booleana da rede através da regra da maioria da vizinhança. Primeiramente, efetuam-se buscas evolutivas por topologias de redes guiadas pela métrica ω , esta referente à classificação de redes de mundo pequeno, e em seguida, efetuam-se buscas evolutivas no espaço de possíveis funções Booleanas utilizando as topologias de redes encontradas anteriormente.

Palavras-chave: *Redes Booleanas, autômatos celulares, classificação de densidade, computação evolutiva.*

ABSTRACT

Boolean networks consist of nodes that represent binary variables, which are computed as a function of the values represented by their adjacent nodes. This local processing entails global behaviors, such as the convergence to fixed points, a behavior found in the context of the density classification problem, where the aim is the network's convergence to a fixed point of the prevailing node value in the initial global configuration of the network; in other words, a global decision is targeted, but according to a constrained, non-global action. In this work, we rely on evolutionary searches in order to find rules and network topologies with good performance in the task. All nodes' neighborhoods are assumed to be defined by non-regular and bidirectional links, and the Boolean function of the network initialized by the local majority rule. Firstly, is carried out a search in the space of network topologies, guided by the ω metric, related to the "small-worldness" of the networks, and then, in the space of Boolean functions, but constraining the network topologies to the best family identified in the previous experiment.

Keywords: *Boolean networks, cellular automata, density classification, evolutionary computing.*

Sumário

| | |
|--|-----------|
| Lista de Figuras | 1 |
| Lista de Tabelas | 4 |
| 1 Introdução | 5 |
| 2 Fundamentos | 8 |
| 2.1 Grafos e Redes | 8 |
| 2.1.1 Redes Aleatórias (<i>Random Networks</i>) | 11 |
| 2.1.2 Redes Livres de Escala (<i>Scale-Free Networks</i>) | 12 |
| 2.1.3 Redes de Mundo Pequeno (<i>small-world networks</i>) | 13 |
| 2.1.4 Métricas para Redes de Mundo Pequeno | 16 |
| 2.1.5 Redes Booleanas | 18 |
| 2.2 Autômatos Celulares | 19 |
| 2.3 Tarefa de Classificação de Densidade - <i>DCT</i> | 20 |
| 2.4 Mecanismos Evolutivos | 23 |
| 3 Metodologia | 25 |
| 3.1 Relação entre probabilidade de reconexão de arestas e Coeficiente Ômega (ω) | 28 |
| 3.2 Variação do coeficiente de agrupamento (C) frente à operação de mutação | 30 |
| 4 Experimentos e Resultados | 33 |
| 4.1 Busca evolutiva de topologias em determinadas faixas de ω | 33 |
| 4.2 Evolução temporal da Tarefa de Classificação de Densidade <i>DCT</i> | 38 |
| 4.3 Busca evolutiva de regras | 39 |
| 4.4 Teste de esforço da <i>DCT</i> nos melhores indivíduos | 40 |
| 5 Considerações Finais | 43 |
| Apêndice A - Experimento da Seção 4.1 (binomial) | 45 |
| A.1 Gráficos de Evolução do Caminho Mínimo Médio (L) | 45 |
| A.2 Gráficos de Evolução do Coeficiente de Agrupamento (C) | 49 |
| A.3 Gráficos de Evolução do Coeficiente Ômega (ω) | 53 |
| A.4 Gráficos de Evolução da Avaliação da <i>DCT</i> | 57 |
| A.5 Gráficos de Evolução do Número de Passos de Tempo (η) da <i>DCT</i> | 61 |

| | |
|---|-----------|
| Apêndice B - Experimento da Seção 4.1 (Nearly Bal.) | 65 |
| B.1 Gráficos de Evolução do Caminho Mínimo Médio (L) | 65 |
| B.2 Gráficos de Evolução do Coeficiente de Agrupamento (C) | 69 |
| B.3 Gráficos de Evolução do Coeficiente Ômega (ω) | 73 |
| B.4 Gráficos de Evolução da Avaliação da DCT | 77 |
| B.5 Gráficos de Evolução do Número de Passos de Tempo (η) da DCT | 81 |
| Apêndice C - Experimento da Seção 4.3 | 85 |
| C.1 Gráficos de Evolução da Avaliação da DCT (Binomial) | 85 |
| C.2 Gráficos de Evolução da Avaliação da DCT (Nearly Bal.) | 89 |
| Referências Bibliográficas | 93 |

Lista de Figuras

| | | |
|----|---|----|
| 1 | Rede em anel equivalente a um reticulado com condição de contorno periódica com raio de vizinhança $r = 1$, ou seja, uma célula pode obter o estado das duas células imediatamente adjacentes à ela (1 célula à direita e 1 à esquerda). | 6 |
| 2 | Relaxamento da relação de vizinhança. A aresta (9,8) é substituída pela aresta (9,5) (<i>atalho</i>). | 7 |
| 3 | Sugestão de uma taxonomia de redes. Fonte: (HEXMOOR, 2015), p.3 . . . | 10 |
| 4 | Exemplo de uma rede representada graficamente por um grafo com vértices e arestas não rotuladas. | 10 |
| 5 | Exemplo de uma rede aleatória $G = (50, \frac{5}{100})$ | 11 |
| 6 | Exemplo de uma rede livre de escala. Em destaque pode-se ver os elementos conhecidos como <i>hubs</i> | 12 |
| 7 | Um grafo cujo vértice V possui coeficiente de agrupamento igual a $C(v) = \frac{4}{6}$. | 13 |
| 8 | Um grafo com as arestas do tipo atalho em destaque. Este grafo pode representar uma rede de amizades fictícia com as relações de amizade casuais sendo representadas por arestas do tipo atalho. | 14 |
| 9 | Procedimento de redefinição de arestas. Fonte: (WATTS; STROGATZ, 1998) | 15 |
| 10 | Caminho mínimo médio $L(p)$ e coeficiente de agrupamento $C(p)$ em função da probabilidade p usada na operação de reconexão de arestas. Todos os pontos do gráfico foram normalizados pelos valores $L(0)$ e $C(0)$, referentes a uma rede regular. Fonte: (WATTS; STROGATZ, 1998) | 16 |
| 11 | Raio de vizinhança $r = 1$ em um reticulado unidimensional. | 19 |
| 12 | As oito possíveis configurações para o raio de vizinhança $r = 1$ | 20 |
| 13 | Representação lexicográfica da regra 254. | 20 |
| 14 | Regra 232 do espaço de autômatos elementares. | 22 |
| 15 | Mecanismo de seleção pela roleta. | 26 |
| 16 | Relação entre probabilidade de reconexão de arestas e ω | 29 |
| 17 | Variabilidade do coeficiente de agrupamento na operação de reconexão. . . | 31 |
| 18 | Representações visuais para as redes com o melhor desempenho na <i>DCT</i> com distribuição binomial e <i>nearly balanced</i> nas execuções de 1 a 4. | 35 |
| 19 | Representações visuais para as redes com o melhor desempenho na <i>DCT</i> com distribuição binomial e <i>nearly balanced</i> nas execuções de 5 a 7. | 36 |
| 20 | Exemplo de 5 evoluções temporais para <i>DCT</i> avaliadas com sucesso. | 38 |
| 21 | Exemplo de evolução temporal para <i>DCT</i> avaliada com falha. | 39 |
| 22 | Exemplo de 2 evoluções temporais com estado final fixo para <i>DCT</i> com falha. | 39 |

| | | |
|----|--|----|
| 23 | Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 1 e 2. | 45 |
| 24 | Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 3 e 4. | 46 |
| 25 | Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 5 e 6. | 47 |
| 26 | Evolução do caminho mínimo médio na execução 7. | 48 |
| 27 | Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 1 e 2. | 49 |
| 28 | Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 3 e 4. | 50 |
| 29 | Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 5 e 6. | 51 |
| 30 | Evolução do coeficiente de agrupamento na execução 7. | 52 |
| 31 | Evolução do coeficiente ω nas execuções 1 e 2. | 53 |
| 32 | Evolução do coeficiente ω nas execuções 3 e 4. | 54 |
| 33 | Evolução do coeficiente ω nas execuções 5 e 6. | 55 |
| 34 | Evolução do coeficiente ω na execução 7. | 56 |
| 35 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> nas execuções 1 e 2. | 57 |
| 36 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> nas execuções 3 e 4. | 58 |
| 37 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> nas execuções 5 e 6. | 59 |
| 38 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> na execução 7. | 60 |
| 39 | Evolução do número de passos de tempo da <i>DCT</i> nas execuções 1 e 2. | 61 |
| 40 | Evolução do número de passos de tempo da <i>DCT</i> nas execuções 3 e 4. | 62 |
| 41 | Evolução do número de passos de tempo da <i>DCT</i> nas execuções 5 e 6. | 63 |
| 42 | Evolução do número de passos de tempo da <i>DCT</i> na execução 7. | 64 |
| 43 | Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 1 e 2. | 65 |
| 44 | Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 3 e 4. | 66 |
| 45 | Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 5 e 6. | 67 |
| 46 | Evolução do caminho mínimo médio na execução 7. | 68 |
| 47 | Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 1 e 2. | 69 |
| 48 | Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 3 e 4. | 70 |
| 49 | Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 5 e 6. | 71 |
| 50 | Evolução do coeficiente de agrupamento na execução 7. | 72 |
| 51 | Evolução do coeficiente ω nas execuções 1 e 2. | 73 |
| 52 | Evolução do coeficiente ω nas execuções 3 e 4. | 74 |
| 53 | Evolução do coeficiente ω nas execuções 5 e 6. | 75 |
| 54 | Evolução do coeficiente ω na execução 7. | 76 |

| | | |
|----|---|----|
| 55 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> nas execuções 1 e 2. | 77 |
| 56 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> nas execuções 3 e 4. | 78 |
| 57 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> nas execuções 5 e 6. | 79 |
| 58 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> na execução 7. | 80 |
| 59 | Evolução do número de passos de tempo da <i>DCT</i> nas execuções 1 e 2. . . . | 81 |
| 60 | Evolução do número de passos de tempo da <i>DCT</i> nas execuções 3 e 4. . . . | 82 |
| 61 | Evolução do número de passos de tempo da <i>DCT</i> nas execuções 5 e 6. . . . | 83 |
| 62 | Evolução do número de passos de tempo da <i>DCT</i> na execução 7. | 84 |
| 63 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> (binomial) nas execuções 1 e 2. | 85 |
| 64 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> (binomial) nas execuções 3 e 4. | 86 |
| 65 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> (binomial) nas execuções 5 e 6. | 87 |
| 66 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> (binomial) na execução 7. | 88 |
| 67 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> (<i>nearly balanced</i>) nas execuções 1 e 2. . . . | 89 |
| 68 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> (<i>nearly balanced</i>) nas execuções 3 e 4. . . . | 90 |
| 69 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> (<i>nearly balanced</i>) nas execuções 5 e 6. . . . | 91 |
| 70 | Evolução da avaliação da <i>DCT</i> (<i>nearly balanced</i>) na execução 7. | 92 |

Lista de Tabelas

| | | |
|---|---|----|
| 1 | Análise da variabilidade de ω | 30 |
| 2 | Resultados encontrados na busca evolutiva de topologias. | 34 |
| 3 | Resultados antes e depois das execuções da busca evolutiva de regras. . . . | 40 |
| 4 | Resultados antes e depois do teste de esforço da <i>DCT</i> para os melhores indivíduos obtidos pela busca evolutiva de topologias. | 41 |
| 5 | Resultados antes e depois do teste de esforço da <i>DCT</i> para os melhores indivíduos obtidos pela busca evolutiva de regras. | 42 |

Capítulo 1

Introdução

Observam-se na natureza diversos tipos de sistemas que exibem comportamentos ou características que emergem a partir de pequenas interações entre seus agentes. Em outras palavras, são sistemas onde não existem entidades centrais responsáveis por controlar e transmitir informações. Nesta categoria enquadram-se os sistemas imunológicos, as interações entre proteínas em processos metabólicos de seres vivos, as redes sociais e até mesmo alguns aspectos do sistema econômico mundial (HEXMOOR, 2015).

O grande desafio é encontrar um modelo que represente com certa precisão tais sistemas, de modo a tornar o seu estudo mais fácil e acessível, no sentido de compreender melhor sua complexidade e imprevisibilidade inerentes. Diversos problemas da área de autômatos celulares (especializações de rede Booleanas) servem como analogia para situações do mundo real, e para este trabalho será estudada a tarefa de classificação de densidade, onde a partir de uma configuração inicial avalia-se um autômato celular por um número pré-determinado de passos, procurando ao final de tal processamento um estado fixo, que reflete a predominância de determinado estado quando do início de todo o processamento. Neste tipo de tarefa, há a necessidade de se obter um meio de comunicação eficiente para computar uma propriedade global com base apenas em informações estritamente locais.

A tarefa de classificação de densidade torna-se desafiadora principalmente devido à vizinhança das células do autômato ser restrita a um tamanho que não permite a visão geral dos estados de todas as células. Como evidenciado em (DE OLIVEIRA, 2014), muitas propostas de relaxamento das restrições usuais dos autômatos celulares foram sugeridas para tornar a tarefa de classificação de densidade possível na maioria das vezes (vide Seção 2.3 para mais detalhes). Ainda em (CHIRA; ANDREICA, 2014), vê-se que algumas topologias de redes podem servir como alternativa à representação usual em reticulados, com destaque para a topologia de rede de mundo pequeno.

Autômatos celulares unidimensionais, que atuam sobre configurações finitas, podem ser representados por redes regulares com topologia em anel. Na Figura 1, apresenta-se

esse comparativo.

O raio de vizinhança r de uma célula define o alcance ou abrangência relativa a capacidade de se obter o estado de outra célula a partir dela mesma. Note que o raio de vizinhança das células está intimamente ligado ao grau do vértice do grafo que representa a rede.

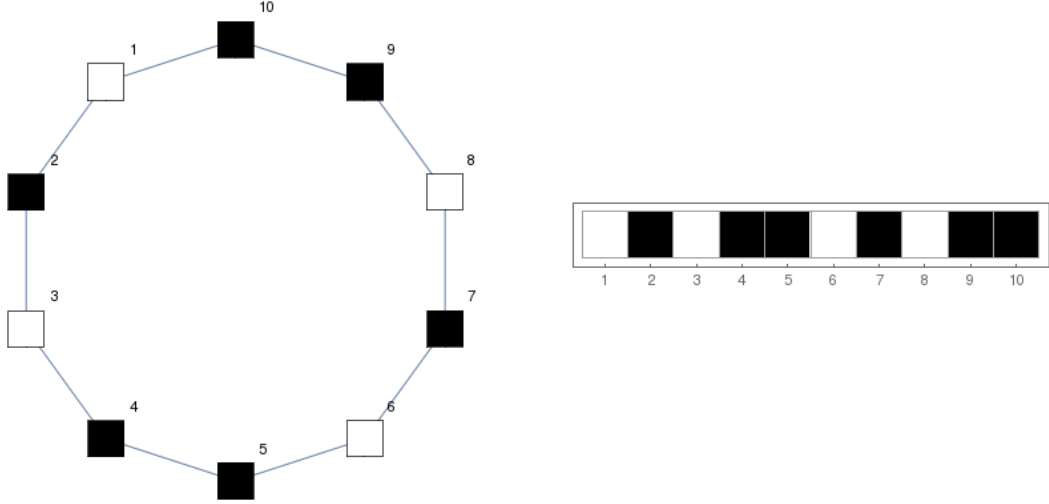


Figura 1: Rede em anel equivalente a um reticulado com condição de contorno periódica com raio de vizinhança $r = 1$, ou seja, uma célula pode obter o estado das duas células imediatamente adjacentes à ela (1 célula à direita e 1 à esquerda).

Neste trabalho serão avaliadas diversas topologias de redes Booleanas, servindo assim como alternativa aos autômatos celulares unidimensionais com condição de contorno periódica usuais. Inspirando-se nos mecanismos evolutivos descritos em (TOMASSINI; GIACOBINI; DARABOS, 2005), (DARABOS; GIACOBINI; TOMASSINI, 2007) e (CHIRA; ANDREICA, 2014), realizam-se buscas evolutivas por topologias de redes, orientada pela métrica ω (Seção 2.1.4) e utilizando a operação de reconexão de arestas para obtenção de novas topologias. Realizam-se também buscas evolutivas por regras, estas responsáveis pela avaliação dos estados dos nós da rede. Em ambas as buscas, procura-se encontrar indivíduos (topologias e regras) que proporcionam boa performance na tarefa de classificação de densidade.

De modo a procurar um relaxamento da relação rígida de vizinhança encontrada em autômatos celulares, utilizou-se a operação de reconexão de arestas utilizada na construção de redes de mundo pequeno (WATTS; STROGATZ, 1998). Basicamente, substituem-

se algumas conexões de amplitude local por conexões de amplitude maior (não locais). Em (GODOY; TABACOF; VON ZUBEN, 2017) pode-se ver como o processamento de informações é afetado pela presença de arestas reconectadas (*atalho*) nas redes de mundo pequeno e como a topologia está relacionada com comportamentos individuais e coletivos. Na Figura 2, vê-se o uso de uma aresta do tipo *atalho* no relaxamento da relação de vizinhança de uma célula.

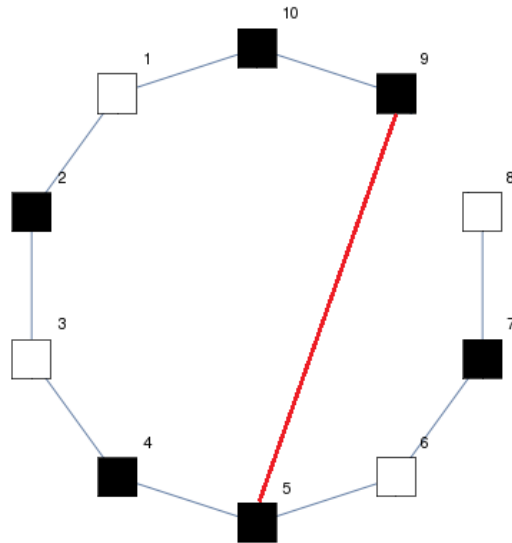


Figura 2: Relaxamento da relação de vizinhança. A aresta (9,8) é substituída pela aresta (9,5) (*atalho*).

A seguir, no Capítulo 2 (Seções 2.1 e 2.2) encontram-se os conceitos de grafos, redes e autômatos celulares. Ainda nas Seções 2.1.1, 2.1.2, 2.1.3 e 2.1.5 verificam-se as particularidades de redes do tipo aleatória, livre de escala, mundo pequeno e Booleanas. Já na Seção 2.3 encontram-se os conceitos específicos relacionados à tarefa de classificação de densidade e por fim na Seção 2.4 encontra-se o embasamento teórico para os mecanismos evolutivos utilizados no trabalho.

A metodologia adotada no trabalho, assim como os experimentos e resultados obtidos, podem ser encontrados respectivamente no Capítulo 3 e Capítulo 4. Já no Capítulo 5 encontram-se as considerações finais do trabalho e pesquisas futuras.

Capítulo 2

Fundamentos

2.1 Grafos e Redes

Definição 2.1. Dado o conjunto $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, a potência cartesiana V^2 representa o conjunto de todos os pares ordenados (v_1, v_2) onde $v_i \in V$.

Definição 2.2. Um grafo é um par ordenado $G = (V, A)$, sendo $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ o conjunto de **vértices** e $A = \{(v_1, v_2) \in V^2 \mid (v_1, v_2) = (v_2, v_1)\}$ o conjunto de **arestas**.

Definição 2.3. Uma aresta (v, w) **incide** sobre os vértices v e w , representando assim uma relação de **vizinhança** ou **adjacência** entre tais vértices.

Definição 2.4. O **grau** de um vértice representa o número de arestas que nele incidem. Por exemplo, no grafo $G = (\{a, b, c\}, \{(a, b), (a, c), (b, c)\})$ o vértice a possui grau 2, pois nele incidem duas arestas.

Definição 2.5. Um grafo **regular** de ordem k é um grafo, onde cada um dos vértices $v \in V$ possui k arestas incidentes em si. Portanto, o grafo $G = (\{a, b, c\}, \{(a, b), (a, c), (b, c)\})$ é um grafo regular de ordem 2.

Definição 2.6. A aresta (v, w) é considerada um **laço**, quando $v = w$.

Definição 2.7. Um grafo completo é um grafo sem laços, onde todo vértice $v \in V$ é adjacente aos demais.

Proposição 2.1. O número de arestas de um grafo completo com k vértices é dado por $\frac{k(k-1)}{2}$.

Demonstração. Por indução:

a) Se $k = 1$, não existem arestas. Portanto, $\frac{1(1-0)}{2} = 0$.

b) Assume-se que um grafo completo com k vértices possui $k(k-1)/2$. Portanto, quando adicionamos o vértice $k+1$, precisamos conecta-lo aos k vértices já existentes, necessitando assim de k arestas adicionais. Portanto, teremos:

$$\frac{k(k-1)}{2} + k = \frac{(k+1)((k+1)-1)}{2} \quad \text{vértices} \quad (1)$$

□

Definição 2.8. Um **subgrafo** de um grafo G , é um grafo H onde, $V(H) \subseteq V(G)$ e $A(H) \subseteq A(G)$, sendo V o conjunto de vértices e A o conjunto de arestas.

Definição 2.9. Seja v um vértice de um grafo G , o **subgrafo da vizinhança** de v é um grafo H' onde $V(H') \subset V(G)$ e $A(H') \subset A(G)$, sendo $V(H')$ o conjunto de vértices adjacentes à v e $A(H')$ o conjunto de arestas incidentes apenas nos vértices adjacentes à v .

Definição 2.10. Um **caminho** em um grafo G sem laços, é uma permutação $P_v = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ tal que $\{(v_1, v_2), (v_2, v_3), \dots, (v_{n-1}, v_n)\} \subseteq A(G)$, sendo A o conjunto de arestas. O **tamanho** ou **comprimento** do caminho é o número de elementos da permutação P_v .

Definição 2.11. Um **caminho mínimo** em um grafo G sem laços, é um caminho cujo comprimento é mínimo.

Uma rede é um conjunto de indivíduos/objetos que estão interligados entre si, podendo representar muitos sistemas presentes no nosso dia a dia. Exemplos incluem relações entre indivíduos em uma rede social, redes organizacionais em empresas, cadeias alimentares, cadeias de distribuição de recursos, cadeias de proteínas em processos metabólicos de seres vivos e até mesmo a conhecida Internet (HEXMOOR, 2015). Muitos desses sistemas são conhecidos por Sistemas Complexos, chamados dessa forma não por serem meramente complicados, mas por compartilharem determinadas características, com destaque para o surgimento espontâneo de padrões de organização em larga escala através de interações simples e restritas entre os componentes do sistema (NEWMAN, 2003).

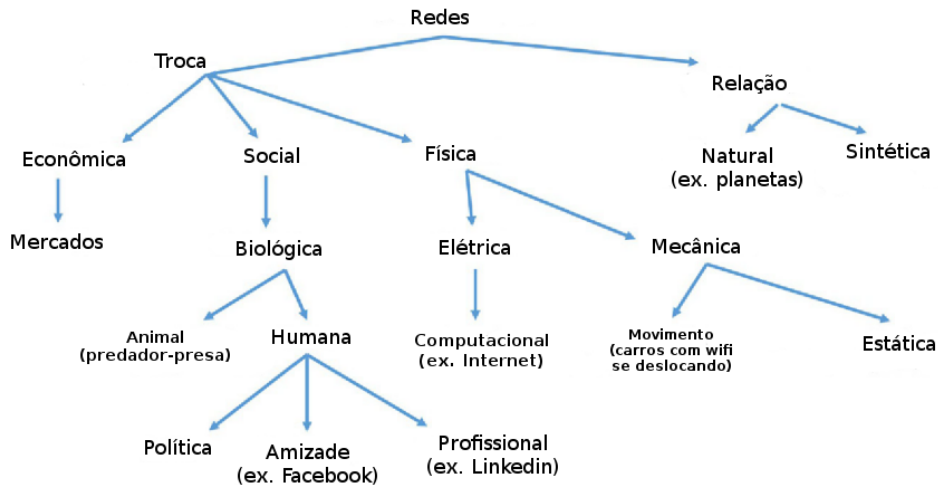


Figura 3: Sugestão de uma taxonomia de redes.

Fonte: (HEXMOOR, 2015), p.3

Recursos visuais (esquemas, diagramas, etc) e modelos matemáticos (grafos, matrizes, etc) podem ser utilizados para representar uma grande diversidade de redes. Um modelo muito utilizado como representação de redes é o grafo, onde associam-se os indivíduos com os vértices e as relações destes indivíduos com as arestas.

Graficamente, pode-se representar os vértices por pontos, e as arestas por segmentos de reta ou linhas que conectam tais pontos. Dependendo do propósito da rede, os vértices e arestas ainda podem estar associados (rotulados) a valores como custo, distância ou qualquer grandeza desejada.

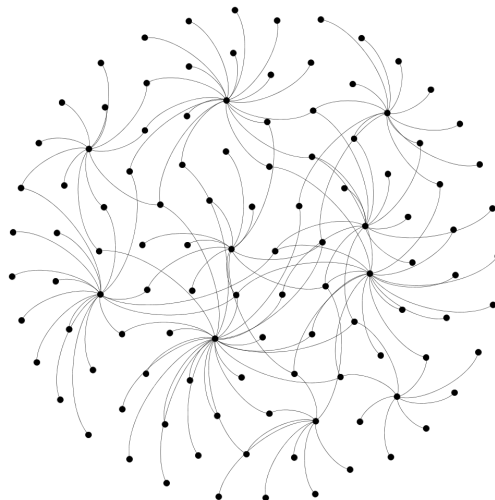


Figura 4: Exemplo de uma rede representada graficamente por um grafo com vértices e arestas não rotuladas.

2.1.1 Redes Aleatórias (*Random Networks*)

Definição 2.12. Uma rede aleatória é representada por um grafo $G(n, p)$, onde n representa o número de vértices do grafo e p é a probabilidade de um vértice se relacionar à outro através de uma aresta (ERDÖS; RÉNYI, 1959).

O domínio dos valores de p está compreendido entre os valores 0 e 1 e nota-se que um valor de p muito próximo a 0 torna o grafo esparso (poucas arestas). Já se p assume um valor próximo de 1 o grafo é fortemente conexo, pois a probabilidade de uma aresta existir é alta. Segundo Erdős e Rényi (1959), quando p se aproxima de $\frac{1}{n}$, o grafo aleatório mantém um considerável nível de conexidade sem ter que ser totalmente conexo ($p \approx 1$), tornando-as comparáveis em alguns aspectos às redes de mundo pequeno (Seção 2.1.3).

Ao descrever o processo de construção de grafos aleatórios, Erdős e Rényi (1959) identificam uma distribuição estatística do tipo binomial para os graus dos vértices. Essa característica torna as redes aleatórias não muito apropriadas para modelar determinados cenários, onde se identifica um padrão de preferência de vínculo (*preferential attachment*) entre os elementos da rede, que obedece à distribuições estatísticas regidas pela lei da potência (BARABASI; ALBERT, 1999). Tais redes são conhecidas como redes livres de escala (Seção 2.1.2), um modelo alternativo às redes aleatórias. Isso pode ser observado em redes sociais, páginas da Internet que referenciam outras mais populares, artigos acadêmicos que tendem a referenciar outros com mais citações, entre outros tantos exemplos.

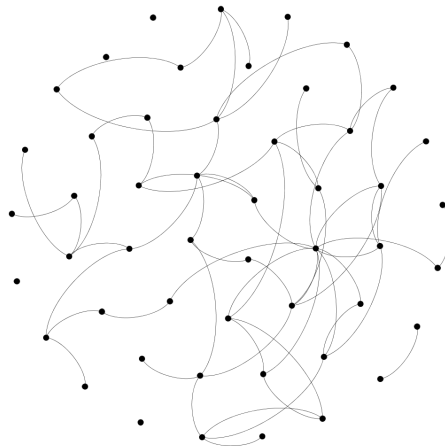


Figura 5: Exemplo de uma rede aleatória $G = (50, \frac{5}{100})$.

2.1.2 Redes Livres de Escala (*Scale-Free Networks*)

Definição 2.13. Uma rede livre de escala é representada por um grafo $G(n, \gamma)$ onde n representa o número de vértices do grafo e γ é o expoente livre de escala, um número real, tipicamente compreendido entre 2 e 3 que caracteriza os graus dos vértices. Ocasionalmente o valor de γ pode estar fora deste intervalo (CHOROMÁŃSKI; MATUSZAK; MIEKISZ, 2013).

Diferente das redes aleatórias que possuem distribuição binomial dos graus de vértices, em redes livres de escala encontra-se uma distribuição estatística que segue a lei da potência (BARABASI; ALBERT, 1999). Neste tipo de distribuição, a probabilidade de um vértice ter k ligações é dada por $P(k) \simeq k^{-\gamma}$, fazendo com que a maioria dos vértices possua um grau baixo e a minoria possua grau alto (nós *hub*). Conclui-se que vértices de grau baixo tendem a se relacionar com os poucos vértices de grau alto, tornando o grafo conexo sem a necessidade do mesmo número de arestas encontradas em grafos fortemente conexos. Redes representadas por tais tipos de grafos são consideradas robustas, capazes de manter suas características principais frente a ataques (remoção ou alteração) de alguns de seus vértices e arestas. Vale destacar que essa robustez é vista frente a ataques aleatórios, e não em ataques intencionais a vértices do tipo *hub*.

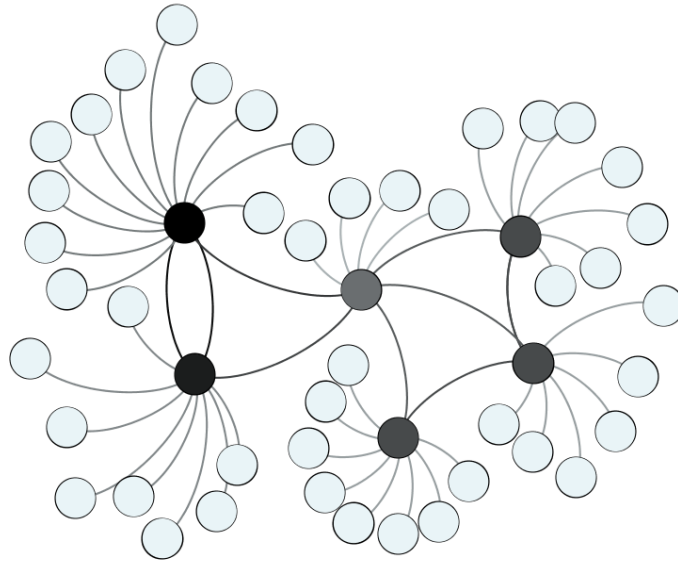


Figura 6: Exemplo de uma rede livre de escala. Em destaque pode-se ver os elementos conhecidos como *hubs*.

As redes livres de escala são bastante adequadas para modelar redes encontradas na natureza, embora ainda existam controvérsias quanto ao seu uso, devido à existência de muitas propostas de representação de redes (CLAUSET; SHALIZI; NEWMAN, 2009). Vale ressaltar que muitas redes livres de escala são redes de mundo pequeno (BARABASI; ALBERT, 1999). As redes de mundo pequeno serão explicadas na próxima seção.

2.1.3 Redes de Mundo Pequeno (*small-world networks*)

Para o entendimento do conceito de rede de mundo pequeno faz-se necessária a apresentação de algumas definições:

Definição 2.14. Seja S o subgrafo da vizinhança de v , então o coeficiente de agrupamento do vértice v é dado por: $C(v) = \frac{n_{Arestas}}{n_{ArestasCompleto}}$, onde $n_{Arestas}$ é o número de arestas de S e $n_{ArestasCompleto}$ é o número de arestas de um grafo completo com o mesmo número de vértices de S .

No exemplo da Figura 7, vê-se que o vértice v se relaciona com os vértices a, b, c, d e que o subgrafo contendo esses vértices possui 4 arestas $((a,b), (a,c), (a,d), (b,c))$. Um grafo completo sem laços contendo 4 vértices possui 6 arestas (Proposição 2.1). Portanto o coeficiente de agrupamento do vértice v é igual a $C(v) = \frac{4}{6}$.

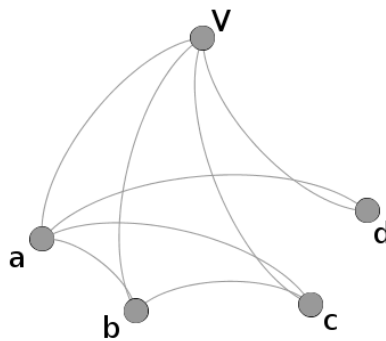


Figura 7: Um grafo cujo vértice V possui coeficiente de agrupamento igual a $C(v) = \frac{4}{6}$.

Definição 2.15. O coeficiente de agrupamento (*clustering coefficient*) de um grafo G , denotado por $C(G)$, é uma propriedade calculada através da média dos coeficientes de agrupamento $C(v)$ de cada um dos vértices de G .

Definição 2.16. O caminho mínimo médio (*average minimum path*) de um grafo G , denotado por $L(G)$, é uma propriedade calculada através da média do tamanho de todos caminhos mínimos entre todos os pares possíveis de vértices de G .

Watts e Strogatz (1998) identificaram que redes de mundo pequeno são representadas por grafos com um alto coeficiente de agrupamento, semelhante ao de um grafo regular, contudo mantendo um valor baixo de caminho mínimo médio, semelhante ao de um grafo aleatório.

Redes de mundo pequeno se assemelham com muitas redes presentes no nosso dia a dia, como por exemplo as redes sociais. Compostas por círculos pequenos de indivíduos com fortes laços de amizade caracterizando uma alta coesão, tais redes permitem também a existência de laços não tão fortes de amizades entre indivíduos de círculos distintos, demonstrando assim uma relação apenas casual. Tais relações casuais garantem que informações transitem com certa rapidez entre os círculos coesos de amizades.

Em um grafo, pode-se agrupar vértices quanto ao grau de coesão entre eles. Esse grau de coesão é dado pela maneira com a qual as arestas incidentes em tais vértices se concentram dentro do grupo, permitindo apenas algumas arestas fora de tais agrupamentos de vértices. Tais arestas, cujo papel é interligar dois ou mais agrupamentos, são conhecidas como arestas atalho (*shortcut*).

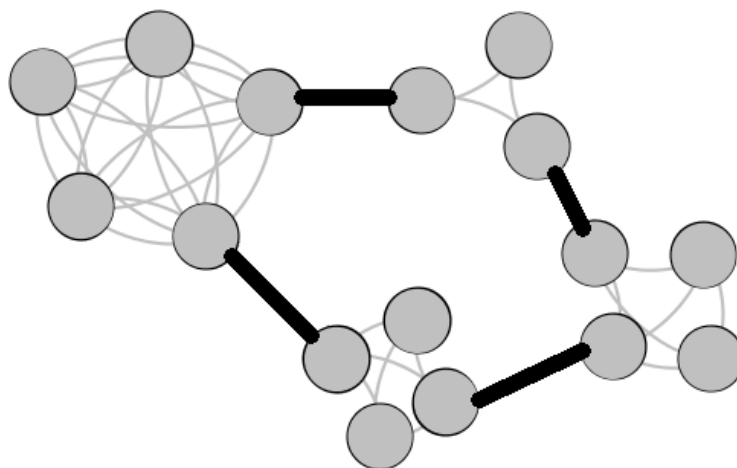


Figura 8: Um grafo com as arestas do tipo atalho em destaque. Este grafo pode representar uma rede de amizades fictícia com as relações de amizade casuais sendo representadas por arestas do tipo atalho.

Watts e Strogatz (1998) propuseram um modelo para obtenção de redes de mundo pequeno, onde as arestas de um grafo regular poderiam ser redefinidas (*rewiring operation*) com base em uma certa probabilidade $0 \leq p \leq 1$. Tal experimento gerou grafos que se situam em algum ponto do espectro estrutural de grafos regulares e aleatórios podendo ser utilizados para representar redes de mundo pequeno.

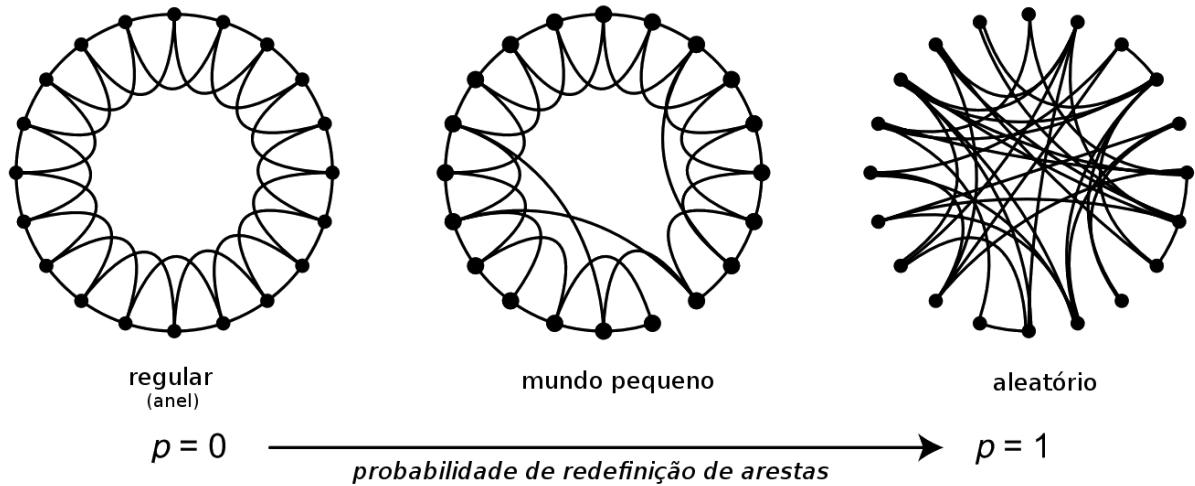


Figura 9: Procedimento de redefinição de arestas.

Fonte: (WATTS; STROGATZ, 1998)

Watts e Strogatz (1998) estudaram os valores de caminho mínimo médio L e os coeficientes de agrupamento C em função da variação da probabilidade p na operação de redefinição de arestas. Tal variação pode ser vista na Figura 10. Percebe-se que quando p se aproxima a 0,001 a partir do valor 0, o grafo mantém um coeficiente de agrupamento $C(p)$ alto (≈ 1), com um decréscimo considerável no valor de caminho mínimo médio $L(p)$, o que caracteriza as redes de mundo pequeno. O valor de $L(p)$ se mantém baixo a partir desse ponto, porém o valor de $C(p)$ só começa a mostrar decréscimos quando p se aproxima de 0,01.

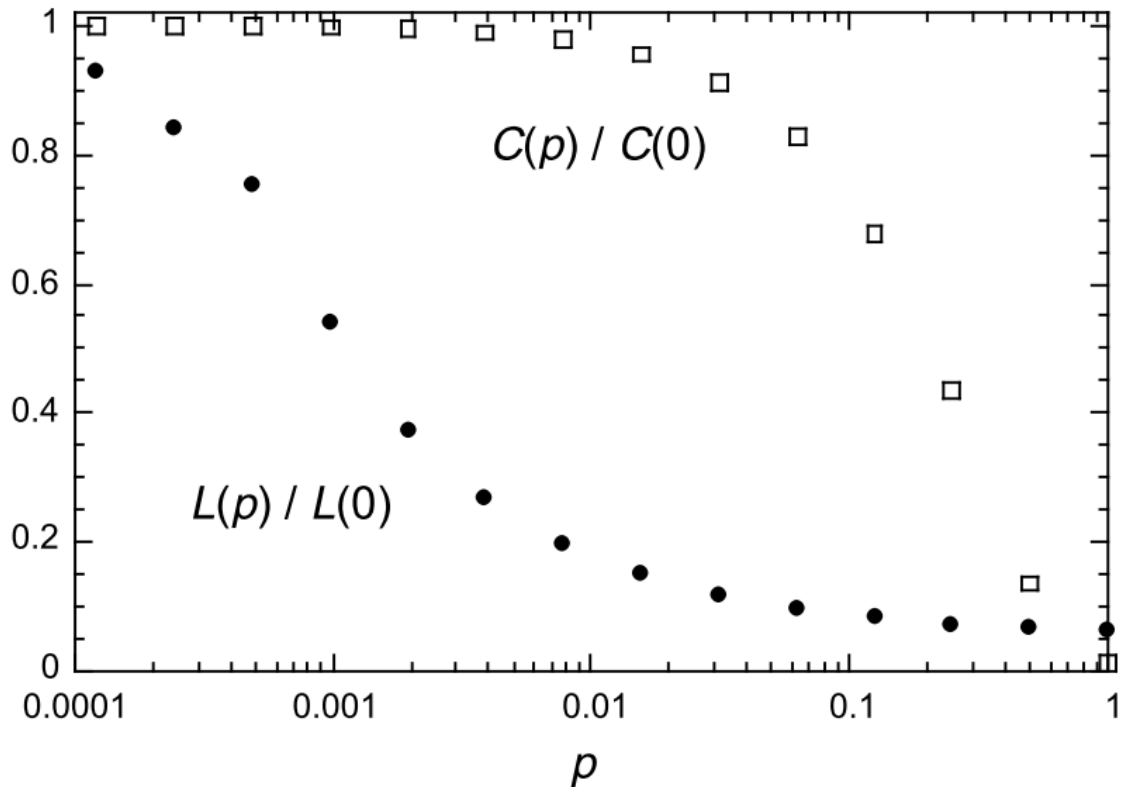


Figura 10: Caminho mínimo médio $L(p)$ e coeficiente de agrupamento $C(p)$ em função da probabilidade p usada na operação de reconexão de arestas. Todos os pontos do gráfico foram normalizados pelos valores $L(0)$ e $C(0)$, referentes a uma rede regular.

Fonte: (WATTS; STROGATZ, 1998)

2.1.4 Métricas para Redes de Mundo Pequeno

No modelo de Watts e Strogatz (1998) não é possível classificar o quão “mundo pequeno” uma rede é apenas verificando os valores de caminho mínimo médio $L(p)$ e de coeficiente de agrupamento $C(p)$. Pesquisadores posteriores à época da divulgação de tal modelo, encontravam sérias dificuldades para classificar as redes de mundo pequeno em seus experimentos. Muitas redes de mundo pequeno compartilhavam os mesmos valores de caminho mínimo médio e de coeficiente de agrupamento, porém possuíam características muito distintas entre si. Para contornar tal situação, obtinham-se artificialmente redes com as características desejadas e comparavam-se os valores de caminho mínimo médio e de coeficiente de agrupamento de tais redes com as que serviam de objeto de estudo, em outras palavras era efetuado um *benchmark* entre os valores.

Dentre as primeiras medidas de *benchmark*, destacou-se a métrica sigma (σ), apresentada em (HUMPHRIES; GURNEY; TJ., 2006) e refinada em (HUMPHRIES; GURNEY, 2008).

Definição 2.17. Ao se replicar G em G' tal que $V(G') = V(G)$ e $A(G') = A(G)$, sendo V o conjunto de vértices e A o conjunto de arestas, G' torna-se um grafo aleatório com a **mesma distribuição de graus de vértices** de G quando, por um número pré-determinado de vezes efetua-se a troca de extremidades de duas arestas de G' selecionadas ao acaso. Exemplo: Sejam as duas arestas (v_1, v_2) e (v_3, v_4) ao efetuar a troca de extremidades, obtém-se as arestas (v_1, v_4) e (v_3, v_2) .

Definição 2.18. Seja G um grafo que representa uma rede qualquer, $G_{aleatorio}$ um grafo aleatório com o mesmo grau de distribuição de vértices de G , e C e $C_{aleatorio}$ seus respectivos coeficientes de agrupamento, então a razão do coeficiente de agrupamento entre os grafos G e $G_{aleatorio}$ é igual a: $\gamma = \frac{C}{C_{aleatorio}}$.

Definição 2.19. Seja G um grafo que representa uma rede qualquer, $G_{aleatorio}$ um grafo aleatório com o mesmo grau de distribuição de vértices de G , e L e $L_{aleatorio}$ seus respectivos valores de caminho mínimo médio, então a razão do caminho mínimo médio entre os grafos G e $G_{aleatorio}$ é igual a: $\lambda = \frac{L}{L_{aleatorio}}$.

Definição 2.20. A métrica sigma (σ) descreve o quão “mundo pequeno” uma rede é, através da razão entre os valores de γ e λ , sendo denotada por $\sigma = \frac{\gamma}{\lambda}$.

De acordo com Humphries e Gurney (2008), quando $\sigma > 1$, a rede em questão é de mundo pequeno. No entanto, a comparação do coeficiente de agrupamento de uma rede qualquer com uma rede aleatória com a mesma distribuição de graus, não reflete adequadamente o comportamento característico da rede de mundo pequeno. Isso ocorre pois o coeficiente de agrupamento encontrado em uma rede de mundo pequeno se assemelha muito mais a de um reticulado, ou seja, um grafo mais regular. Um outro ponto é que o coeficiente de agrupamento de uma rede será maior que o da rede aleatória, mesmo essa contendo o mesmo grau de distribuição dos vértices.

De modo a contornar tal inconveniente, em (TELESFORD et al., 2011) foi sugerido uma métrica mais coerente com as características de agrupamento da rede de mundo pequeno. Tal métrica foi batizada de ômega (ω).

Definição 2.21. Seja G um grafo que representa uma rede qualquer, $G_{aleatorio}$ um grafo aleatório com o mesmo grau de distribuição de vértices de G , e L e $L_{aleatorio}$ seus respectivos valores de caminho mínimo médio, então a razão do caminho mínimo médio entre os grafos $G_{aleatorio}$ e G é igual a: $\tau = \frac{L_{aleatorio}}{L}$.

Definição 2.22. Seja G um grafo que representa uma rede qualquer, $G_{reticulado}$ um grafo regular de grau k contendo as propriedades desejadas para os efeitos comparativos (*benchmark*), e C e $C_{reticulado}$ seus respectivos coeficientes de agrupamento, então a razão do coeficiente de agrupamento entre os grafos G e $G_{reticulado}$ é igual a: $\phi = \frac{C}{C_{reticulado}}$.

Definição 2.23. A métrica ômega (ω) descreve o quão “mundo pequeno” uma rede é, através da diferença dos valores de τ e ϕ , sendo denotada por $\omega = \tau - \phi$.

O domínio de ω está compreendido no intervalo fechado de -1 a 1 , sendo que redes com as características mais marcantes de mundo pequeno possuem $\omega \approx 0$. Valores positivos de ω denotam redes com características mais aleatórias, ou seja, $L \approx L_{aleatoria}$ e $C \ll C_{reticulado}$. Já valores negativos de ω denotam redes com características mais próximas de reticulados, ou seja, $L \gg L_{aleatoria}$ e $C \approx C_{reticulado}$.

2.1.5 Redes Booleanas

Redes Booleanas são uma classe de sistemas dinâmicos discretos caracterizados por interações sobre um conjunto de variáveis Booleanas (SHMULEVICH; DOUGHERTY, 2010). Basicamente, são compostas por nós que representam variáveis binárias computadas em função dos valores representados por nós adjacentes. Foram introduzidas por Kauffman (1969) como um modelo para estudo da dinâmica de redes genéticas regulatórias, identificando particularidades que podem ser utilizadas para compreender redes biológicas previamente conhecidas, porém pouco exploradas.

Definição 2.24. Uma rede Booleana é um par ordenado $B = (G, F)$, onde G é um grafo sem laços que representa a rede, e $F = \{f_1, f_2, \dots, f_n\}$ o conjunto de funções Booleanas da rede. Cada vértice v_i do grafo G , representa uma variável $x_i \in \{0, 1\}$, cujo valor no tempo $t + 1$ é determinado pela função Booleana $f_i : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$, onde n é o número de vértices de G e cujos valores de entrada são os valores das variáveis Booleanas no tempo t representadas pelos vértices adjacentes a v_i .

Definição 2.25. O valor da variável Booleana x_i representada pelo nó v_i no tempo $t + 1$ é dado por:

$$x_i(t + 1) = f_i(x_{j_1}(t), \dots, x_{j_n}(t)) \quad \text{onde,} \quad (2)$$

f_i é a função booleana utilizada para avaliar o valor da variável x_i , e $x_{j_1}(t), \dots, x_{j_n}(t)$ são os valores das variáveis representadas pelos nós adjacentes à v_i

2.2 Autômatos Celulares

Segundo Wolfram (1984), autômatos celulares são modelos matemáticos que podem representar sistemas complexos. De caráter discreto, são compostos por células conectadas entre si através de relações de vizinhança que influenciam em sua dinâmica de estados. A célula de um autômato celular pode assumir estados previamente especificados.

Autômatos celulares representados por reticulados unidimensionais com condição de contorno periódica possuem células cujas relações de vizinhança podem estar tanto à direita como à esquerda. Já em um reticulado bidimensional uma célula possui relações de vizinhança com células ao redor de si mesma. A relação de vizinhança de uma célula pode ser definida em termos de raio de alcance, sendo que em um reticulado unidimensional, a relação de vizinhança mais fundamental é dada por $v = 2r + 1$, onde v é o número de células da vizinhança e r é o raio de alcance. Por exemplo, uma célula com vizinhança de raio 1 possui um tamanho de vizinhança igual à 3 (1 célula à direita, 1 à esquerda e a própria célula em questão), ou seja, essas três células poderão ser utilizadas pelas regras de transição de estados.

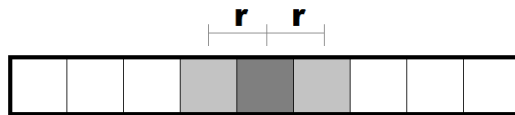


Figura 11: Raio de vizinhança $r = 1$ em um reticulado unidimensional.

A evolução dos estados das células ocorrem em passos de tempo discreto e síncronos de acordo com um conjunto de regras de transição descritas em função dos estados das células dentro do raio de vizinhança.

Definição 2.26. O estado da célula i de um autômato celular no passo de tempo t , é

dado por:

$$a_i^t = f(a_{i-r}^{t-1}, a_{i-r+1}^{t-1}, \dots, a_i^{t-1}, a_{i+r}^{t-1}) \quad \text{onde,} \quad (3)$$

r é raio de alcance da vizinhança, e

f é uma função arbitrária que define a regra do autômato

Considerando um autômato celular unidimensional, com dois estados possíveis para uma célula (preto ou branco) e com vizinhança de raio $r = 1$, Wolfram (1984) define a noção de autômato celular elementar. Visto que em tal caso existem dois estados possíveis para uma célula e que o tamanho da vizinhança $v = 2 \cdot 1 + 1 = 3$, chega-se à conclusão que existem oito estados possíveis para as três células da vizinhança.



Figura 12: As oito possíveis configurações para o raio de vizinhança $r = 1$.

Desta forma, chega-se à conclusão que o número possível de configurações de vizinhanças é igual a 256 (2^8), em outras palavras, existem 256 regras possíveis no espaço elementar. Em (WOLFRAM, 1984), há uma proposta de ordenação lexicográfica para a representação de tais regras. Na Figura 13 vê-se a representação da regra 254 (11111110₂).

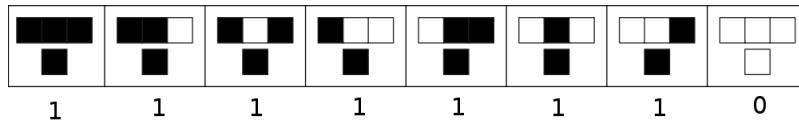


Figura 13: Representação lexicográfica da regra 254.

2.3 Tarefa de Classificação de Densidade - *DCT*

A tarefa de classificação de densidade (do inglês, *Density Classification Task* - *DCT*) é um problema clássico que avalia a capacidade computacional de um autômato celular em avaliar uma propriedade global, neste caso a predominância de um estado particular em um reticulado em termos de computação local, ou seja, realizada na vizinhança das células.

Basicamente, dado um autômato celular qualquer, pergunta-se qual o predominância de determinado estado de célula em todo o reticulado. A resposta a essa pergunta pode ser dada de maneira trivial, contando-se todos os estados do reticulado, porém o problema especifica que tal resposta deve ser obtida através da avaliação das regras de transição das células do autômato celular por um número pré-determinado de passos. Procura-se a convergência dos valores de todos as células para um ponto fixo que reflete o estado predominante presente na configuração inicial do autômato celular.

Em outras palavras, dado um reticulado com uma combinação inicial binária qualquer (células em estado 0 ou 1), o processamento do autômato celular após um número pré-determinado de passos fará convergir todo o reticulado para o estado:

- 0, caso a configuração inicial possuir predominância de zeros, ou
- 1, caso contrário;

A primeira proposta de regra visando solucionar a *DCT* foi a largamente conhecida regra GKL (GACS; KURDYUMOV; LEVIN, 1978). Trata-se de uma regra simples que nem sempre proporciona respostas satisfatórias. Originalmente desenvolvida para autômatos celulares unidimensionais com raio de vizinhança $r = 3$, define-se a_i^t como sendo o estado da célula i no passo de tempo t . Onde:

$$a_i^t = \begin{cases} 1, & \text{se } \rho \geq 2 \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad \rho = \begin{cases} a_{i-1}^{t-1} + a_{i-r}^{t-1}, & \text{se } a_i^{t-1} = 0 \\ a_i^{t-1} + a_{i+1}^{t-1} + a_{i+r}^{t-1}, & \text{se } a_i^{t-1} = 1 \end{cases} \quad (4)$$

Evidentemente deve-se fazer os ajustes necessários aos índices $i - 1$, $i + 1$, $i - r$ e $i + r$ em função da condição de contorno do autômato celular.

Outra regra a se destacar é a regra da maioria, muito citada em trabalhos relacionados à física, à teoria dos jogos, *bootstrap percolation* e modelos sociais / econômicos onde procura-se estudar fenômenos relacionados à consensualidade de comportamentos ou ideias. Basicamente é uma regra que define um estado em termos da maioria local. Em (KRAPIVSKY; REDNER, 2003) explora-se a riqueza dinâmica da regra da maioria aplicada em modelos baseados em reticulados com diversas dimensões, funcionando como ferramenta de estudos na teoria de campo médio, onde o estado de um indivíduo é

aproximado ao estado dos outros indivíduos no entorno. Dentre tais modelos, se destaca o modelo Ising (BRUSH, 1967), que é o modelo mais simples para iterações ferromagnéticas. Em (MAKOWIEC, 2004), tal modelo é estudado com enfoque na topologia, fazendo uso da regra da maioria como regra de transição de estados e redes de mundo pequeno como topologia para os reticulados. Já em (GOLES; MONTEALEGRE, 2014) e (GOLES et al., 2017) a regra da maioria é estudada no contexto de *bootstrap percolation*, que pode ser visto como um modelo epidêmico aplicável em várias áreas como nos estudos de computação distribuída e sistemas tolerantes a falhas, onde procura-se determinar a probabilidade de falhas que um sistema pode tolerar de modo a não entrar em total colapso.

Abaixo, podemos ver a representação gráfica da regra da maioria que no espaço dos autômatos elementares é representada pelo número decimal 232, cuja representação binária é 11101000 :



Figura 14: Regra 232 do espaço de autômatos elementares.

Nota-se que em tal regra o estado de uma célula é definido pela maioria dos estados da vizinhança. Infelizmente tal característica local não contribui de maneira significativa quando se procura a maioria em termos globais, conforme a formulação da tarefa de classificação de densidade, sendo essa característica ainda mais perceptível em autômatos celulares unidimensionais, onde o raio de vizinhança é muito restrito.

Dezessete anos após a proposta da primeira regra para solução da tarefa de classificação de densidade (regra GKL), Land e Belew (1995) mostram que a *DCT* não pode ser resolvida perfeitamente com autômatos celulares de dois estados com raio de vizinhança $r \geq 1$. Contudo, relaxando algumas das condições iniciais, pode-se encontrar regras que nos proporcionam soluções quase perfeitas. Em (DE OLIVEIRA, 2014) encontra-se um extenso levantamento quanto às diversas propostas de relaxamentos das restrições presentes na definição de um autômato celular clássico para a *DCT*, dentre as quais pode-se destacar:

- Condição de contorno fixa;

- Combinação temporal de regras, onde determinada regra é adotada após um número pré-determinado de passos de tempo;
- Autômatos celulares não uniformes, onde são atribuídas diferentes regras para determinadas faixas de células do reticulado;
- Regras com memória, onde o histórico de alterações de estados das células são utilizados na avaliação da regra;
- Uso de regras estocásticas, ou seja, alterando a característica determinística na alteração de estados das células do reticulado;
- Avaliação assíncrona de regras com o uso de agentes independentes, relaxando a avaliação síncrona encontrada na definição de um autômato celular clássico;
- Uso de múltiplos estados ($k \geq 3$), sendo que dois desses estados representam zeros e uns (definidos na *DCT*), e os demais estados representam valores auxiliares para a computação da *DCT*.

2.4 Mecanismos Evolutivos

A chance de sobrevivência de um indivíduo está intimamente ligada à sua capacidade de adaptação ao ambiente, definindo formalmente o processo de seleção natural, onde os indivíduos detentores de características mais apropriadas para enfrentar as adversidades do ecossistema são aqueles com maior probabilidade de reproduzir-se e transmitir suas características aos seus descendentes (JONG, 2006). As diversas características ditas favoráveis são preservadas em detrimento das não favoráveis. A descoberta da genética por Mendel veio a explicar mais tarde, como tais características são transmitidas de uma geração para outra. As ideias originais de Darwin somadas às descobertas genéticas de Mendel, vieram a criar o conceito de Neo-Darwinismo (FISHER, 1930).

Entre o final da década de 1950 e 1960, o Neo-Darwinismo serviu de inspiração para descrever a uso de mecanismos evolutivos para a solução de problemas de otimização. Fogel, Owens e Walsh (1966) descrevem tais mecanismos no contexto de inteligência artificial. No mesmo período, John Holland descreve pela primeira vez o conceito de algoritmo genético e durante a década de 70, formaliza o conceito no livro *Adaptation in Natural and Artificial Systems* (HOLLAND, 1975).

Em determinadas classes de problemas, onde o espaço de busca é muito grande, as

soluções ótimas não podem ser encontradas em tempo aceitável pelos algoritmos existentes. Mecanismos evolutivos apresentam em tempo hábil soluções satisfatórias, quando não a própria solução ótima em si. São mecanismos úteis de busca por soluções para problemas complexos, utilizando estruturas de dados computacionais, como vetores de tamanho finito compostos por um alfabeto de símbolos também finito. Os vetores atuam como cromossomos, os itens do vetor são os genes e o alfabeto de símbolos é o conjunto de alelos. A solução de um problema é representado por uma instância desse vetor.

Cada iteração do algoritmo representa uma geração, onde é efetuada a avaliação, seleção, reprodução e mutação dos cromossomos. Os cromossomos detentores das características desejadas são selecionados e cruzados entre si, gerando novos cromossomos. Logo após o cruzamento, os novos cromossomos sofrem mutação. Ambos os operadores (cruzamento e a mutação) estão condicionados a uma certa probabilidade. Conforme as gerações avançam, os genes dos cromossomos convergem para a solução desejada. Esse mecanismo automaticamente descarta as soluções não adequadas, assim como a seleção natural desprivilegia os seres vivos menos adaptados.

Capítulo 3

Metodologia

Na busca evolutiva por topologias, cria-se uma população inicial contendo n indivíduos, cada um representado por uma rede Booleana regular de grau k contendo $m = 149$ nós, processadas por até $\eta = 2m$ passos de tempo, um padrão encontrado na maioria dos estudos relacionados a *DCT*, como em (CHIRA; ANDREICA, 2014) e (DARABOS; GIACOBINI; TOMASSINI, 2007). Adotam-se 1000 configurações de estados iniciais distintas com distribuição binomial e *nearly-balanced*. Em seguida, para cada um dos indivíduos efetua-se a operação de reconexão de arestas descrito em (WATTS; STROGATZ, 1998) e avalia-se a aptidão (*fitness*) de cada um dos indivíduos, sendo esse valor representado pela média de acertos na tarefa de classificação de densidade, dada pelas seguintes equações:

$$fitness(d) = \frac{1}{\zeta} \sum_{i=1}^{\zeta} dct(ci_i, \eta)$$
$$dct(ci, \eta) = \begin{cases} 1, & \text{se a DCT é avaliada com sucesso} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad \text{onde,} \quad (5)$$

d é um indivíduo pertencente à população,

ζ é numero de configurações iniciais,

ci_i é a i -ésima configuração inicial, e

η é o número de passos de tempo.

Após a avaliação de aptidão, efetua-se a operação de elitismo, mantendo para a próxima geração uma parcela dos indivíduos com as melhores avaliações, e em seguida efetua-se o processo de seleção pela roleta (JONG, 2006) nos indivíduos não selecionados pelo processo de elitismo, onde a probabilidade de seleção p_{Selec} de um indivíduo g é

proporcional ao seu grau de aptidão. Tal probabilidade é dada por:

$$p_{Selec}(g) = \frac{fitness(g)}{\sum_{i=1}^{\xi} fitness(g_i)} \quad \text{onde,} \quad (6)$$

g é um indivíduo não selecionado pelo procedimento de elitismo, e

ξ é o número de indivíduos não selecionados pelo procedimento de elitismo.

Nota-se que um indivíduo g pode ser selecionado mais de uma vez, portanto indivíduos mais aptos terão maiores chances de serem selecionados.

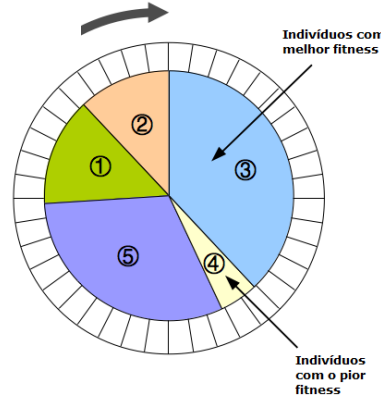


Figura 15: Mecanismo de seleção pela roleta.

Na sequência, realiza-se a operação de mutação, onde para cada nó da rede muda-se aleatoriamente um de seus vizinhos, condicionando tal operação à uma probabilidade p_r . Finalmente, repete-se o ciclo de seleção, elitismo e mutação por z gerações. Analogamente, adota-se a mesma estratégia na busca evolutiva de regras, onde os indivíduos são as regras e não as topologias.

Na busca evolutiva por topologias, optou-se por não efetuar cruzamentos (JONG, 2006) entre indivíduos, visto que ao definir um ponto de corte nas matrizes de adjacências das redes, ocorre perda de arestas nos indivíduos gerados por tal cruzamento, o que compromete a integridade dos indivíduos.

Considera-se em particular para as duas buscas uma população com 100 indivíduos, processados sequencialmente por 200 gerações na busca evolutiva de topologias e por 100 gerações na busca evolutiva por regras. A justificativa para tais valores se encontra nas

limitações de processamento e memória dos computadores utilizados para executar os experimentos.

Quanto ao tipo de distribuição estatística das condições iniciais, utilizam-se dois tipos: binomial e *nearly balanced*, sendo que na distribuição do tipo *nearly balanced* a diferença entre 0's e 1's é de apenas 1 unidade.

Outro ponto a destacar, é que na busca evolutiva por topologias, apenas a topologia da rede sofrerá evolução e a regra de transição de estados dos nós (função booleana) permanecerá fixa, sendo ela a regra da maioria da vizinhança, onde define-se o estado do nó obtendo-se o estado majoritário entre os nós adjacentes. Em caso de empate, obtêm-se um estado dentre 0 e 1 com 50% de probabilidade para cada.

Já na busca evolutiva por regras, a regra sofre evolução e as topologias permanecem fixas. Utiliza-se como ponto de partida a função booleana representada pela configuração binária da regra da maioria da vizinhança, adotando a representação lexicográfica de regras de autômatos celulares descrita em (WOLFRAM, 1984). Em um autômato celular clássico com tamanho de vizinhança fixo, é necessário possuir apenas uma única função Booleana para todas as células. Já em uma rede Booleana com tamanhos de vizinhança irregulares, fez-se necessária a adoção de uma função booleana específica por tamanho de vizinhança.

Diferente da busca evolutiva por topologias, desta vez os indivíduos passam por cruzamento, efetuando-se todas as combinações possíveis de pares de indivíduos, onde em cada par escolhe-se aleatoriamente um único ponto de corte na sequência de bits. Já no processo de mutação, para cada um dos bits é efetuada a sua inversão (*flip*) condicionada a uma probabilidade p_f .

Nas duas buscas evolutivas (topologia e regras) optou-se pela regra da maioria da vizinhança como ponto de partida, pois foi constatado redução de esforço computacional na busca evolutiva frente ao uso de uma configuração aleatória qualquer.

3.1 Relação entre probabilidade de reconexão de arestas e Coeficiente $\hat{\Omega}$ (ω)

Na Figura 10 (Seção 2.1.3) podemos ver a evolução dos valores de caminho mínimo médio (L) e coeficiente de agrupamento (C) em função da probabilidade de reconexão de arestas (p). Porém, fez-se necessária a obtenção de uma relação entre os valores de p e ω , pois o mecanismo evolutivo cria inicialmente os indivíduos em função de ω e não p . Isso ocorre, pois o valor da probabilidade de reconexão de arestas é insuficiente para definir um indivíduo com as características de mundo pequeno mais marcantes ($-0,5 \leq \omega \leq 0,5$) (TELESFORD et al., 2011). De modo a identificar uma relação entre p e ω , criam-se 4 conjuntos para o valor da probabilidade de reconexão de arestas:

- $0 \leq p \leq 0,001$ (redes mais próximas do espectro regular);
- $0,001 \leq p \leq 0,01$ (redes com as características marcantes de mundo pequeno - baixo caminho mínimo médio (L) e alto coeficiente de agrupamento (C));
- $0,01 \leq p \leq 0,1$ (redes de mundo pequeno, porém já com uma certa degradação do coeficiente de agrupamento C);
- $0,1 \leq p \leq 1$ (redes mais próximas do espectro aleatório).

Em seguida, dividiu-se cada um dos conjuntos acima em 200 partes iguais, sendo cada parte um valor de p para a geração de uma rede de mundo pequeno através do modelo descrito em (WATTS; STROGATZ, 1998). O modelo utilizou em sua inicialização redes regulares com grau igual a 8, representado assim reticulados com raio de vizinhança $r = 4$. Após a obtenção das redes de mundo pequeno, avaliou-se o valor de $\omega(p)$ para cada uma delas. Abaixo podemos ver o gráfico do parâmetro ω em função de p para as 800 redes, ou seja, 200 redes por conjunto:

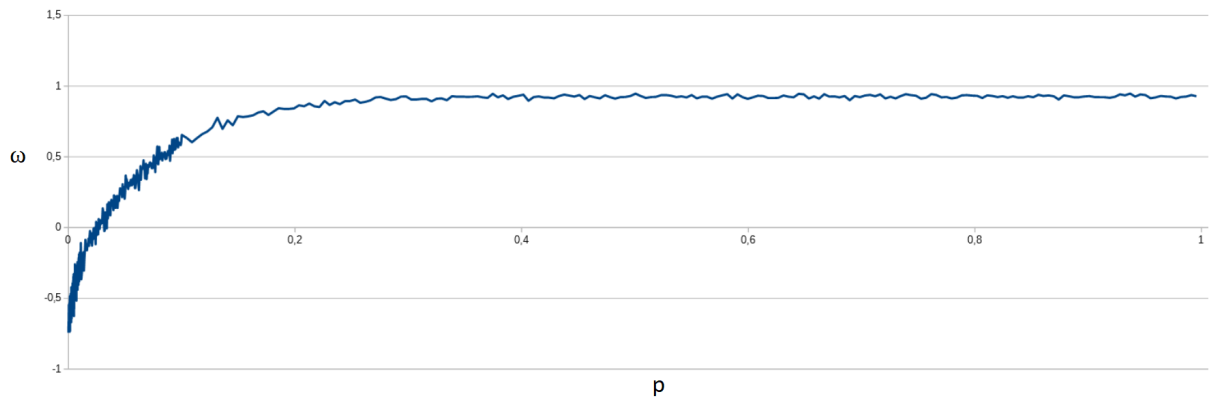


Figura 16: Relação entre probabilidade de reconexão de arestas e ω .

De modo a verificar a homogeneidade dos valores obtidos nessa análise, efetuou-se a divisão de cada um dos 4 conjuntos em quartis, e para cada quartil, obteve-se o ponto médio entre o ponto inicial e o ponto de corte do quartil, totalizando 16 pontos médios. Para cada ponto médio foram criadas 1000 redes de mundo pequeno, tomando como probabilidade p para o modelo Watts-Strogatz o valor do ponto médio em si. Em seguida, obteve-se a média μ e o desvio padrão (σ) dos 1000 valores de ω obtidos. Apesar do domínio de ω ($-1 \leq \omega \leq 1$) contemplar números negativos, podemos normalizar o valor de ω adicionando 1, transformando-o de uma escala intervalar em uma escala de razão, adequada para o cálculo do coeficiente de variação $CV = \frac{\sigma}{\mu}$ (SHUANG, 2012), que descreverá a homogeneidade de ω .

A classificação do valor CV em baixo, médio ou alto, varia de acordo com a aplicação. Nesse caso, para o domínio do valor de ω , uma variabilidade de até 20% é considerado baixo.

| p | μ | $\mu + 1$ | σ | CV (%) |
|----------|--------|-----------|----------|--------|
| 0,000125 | -0,720 | 0,280 | 0,024632 | 8,805 |
| 0,000375 | -0,695 | 0,305 | 0,042885 | 14,046 |
| 0,000625 | -0,674 | 0,326 | 0,049851 | 15,275 |
| 0,000875 | -0,652 | 0,348 | 0,056483 | 16,228 |
| 0,002125 | -0,568 | 0,432 | 0,064341 | 14,889 |
| 0,004375 | -0,453 | 0,547 | 0,064651 | 11,822 |
| 0,006625 | -0,374 | 0,626 | 0,058485 | 9,340 |
| 0,008875 | -0,306 | 0,694 | 0,057262 | 8,249 |
| 0,021250 | -0,063 | 0,937 | 0,051836 | 5,535 |
| 0,043750 | 0,210 | 1,210 | 0,047863 | 3,954 |
| 0,066250 | 0,399 | 1,399 | 0,041179 | 2,944 |
| 0,088750 | 0,538 | 1,538 | 0,037183 | 2,418 |
| 0,212500 | 0,864 | 1,864 | 0,016876 | 0,905 |
| 0,437500 | 0,926 | 1,926 | 0,010157 | 0,527 |
| 0,662500 | 0,927 | 1,927 | 0,010504 | 0,545 |
| 0,887500 | 0,926 | 1,926 | 0,010244 | 0,532 |

Tabela 1: Análise da variabilidade de ω .

Analisando a variabilidade do parâmetro ω , podemos concluir que a homogeneidade em relação a probabilidade p é alta, permitindo a associação entre o valor p e ω ilustrada no gráfico da Figura 16.

3.2 Variação do coeficiente de agrupamento (C) frente à operação de mutação

Durante os experimentos, verificou-se que a operação de mutação (reconexão de aresta) realizava 2 tipos de variações no valor do coeficiente de agrupamento (C) dos indivíduos:

- Decréscimo caso o indivíduo possuísse coeficiente de agrupamento alto;

- Acréscimo ou decréscimo caso o indivíduo possuísse coeficiente de agrupamento baixo.

Porém, a escala de magnitude dos 2 tipos de modificações não se compara em proporcionalidade. Em outras palavras, efetuar uma mutação em um indivíduo com coeficiente de agrupamento alto implica em uma perturbação maior em termos proporcionais do que efetuar mutação em um indivíduo com coeficiente de agrupamento mais baixo. Ao efetuar mutação em indivíduos com coeficiente de agrupamento baixo, observam-se decréscimos e acréscimos inferiores em proporcionalidade comparado com os decréscimos dos indivíduos com coeficiente de agrupamento alto, e em alguns casos pode-se observar nenhuma variação. Portanto, quanto menor o valor do coeficiente de agrupamento de um indivíduo, menor será a perturbação desse coeficiente na operação de mutação.

Para demonstrar isso, foi analisada a alteração do coeficiente de agrupamento para as mesmas 800 redes analisadas na Seção 3.1. Para cada uma dessas redes, foram efetuadas tentativas de reconexão, simulando uma mutação com probabilidade de 10% em cada um dos nós da rede. Após cada operação de reconexão, avaliava-se a diferença entre os valores do coeficiente de agrupamento antes e depois da reconexão.

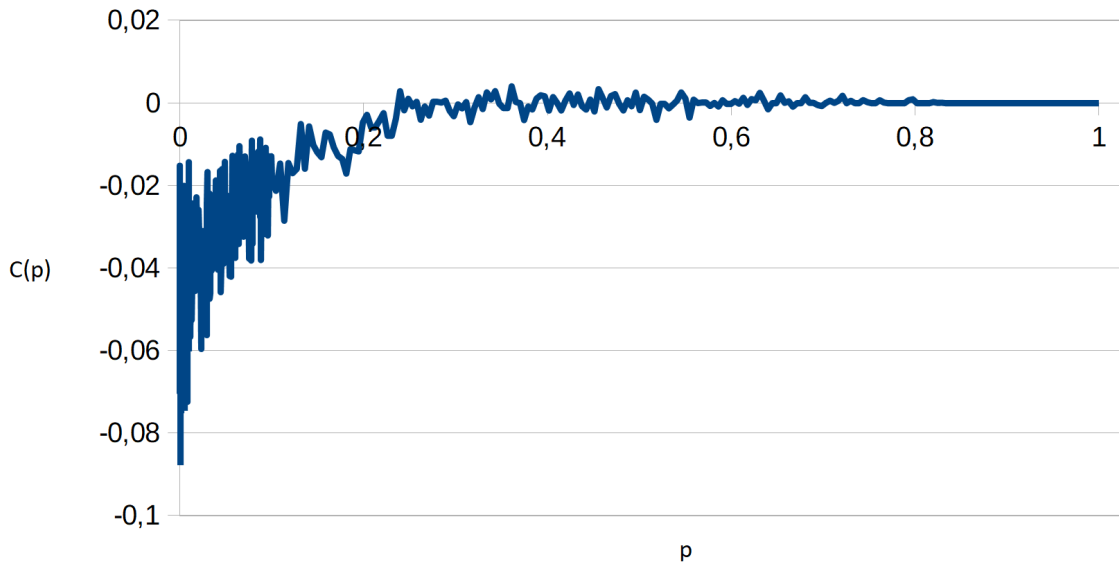


Figura 17: Variabilidade do coeficiente de agrupamento na operação de reconexão.

Na Figura 17, pode-se ver o gráfico de variação do coeficiente de agrupamento após a operação de reconexão para as 800 redes no intervalo de probabilidade entre 0 e 1. Con-

forme afirmado anteriormente, nota-se que a reconexão de arestas influencia fortemente no decréscimo do coeficiente de agrupamento C quando as redes pertencem aos três primeiros grupos ($0 \leq p \leq 0,1$). Observa-se também que o primeiro momento em que C assume valores positivos ocorre quando $p > 0,24$, ou seja, redes referentes ao quarto conjunto ($0,1 \leq p \leq 1$). Porém tais acréscimos não estão na mesma proporção dos decréscimos sofridos nos outros três primeiros conjuntos.

Capítulo 4

Experimentos e Resultados

4.1 Busca evolutiva de topologias em determinadas faixas de ω

Neste experimento, a população será composta por redes pertencentes a determinadas faixas de valores de ω , utilizando um valor de elitismo de 10% e probabilidade de mutação de 1%, valores esses que empiricamente provaram ser mais adequados para a convergência do mecanismo, considerando as limitações de processamento e memória dos computadores utilizados na execução da busca.

Procura-se assim, identificar as faixas de valores de ω onde se encontram redes com boa performance (acima de 80%) na tarefa de classificação de densidade. O valor de $C_{reticulado}$ para o cálculo de ω foi obtido a partir de uma rede regular de grau $k = 8$, representando assim a estrutura de um reticulado com raio de vizinhança $r = 4$. Essa configuração de topologia servirá como referência (*benchmark*) para todas as outras topologias encontradas pelo mecanismo evolutivo.

Vale ressaltar que o intervalo $-1 \leq \omega \leq -0,75$ não foi analisado, pois uma rede regular de grau $k = 8$ possui a maior regularidade possível no experimento, conduzindo a um valor de ω próximo a $-0,73$. Desta forma, não é possível encontrar redes com ω pertencentes ao intervalo $[-1, -0,75]$, visto que a cada nova iteração da busca evolutiva a reconexão de arestas reduz a regularidade do grafo, consequentemente incrementando o valor de ω .

Durante todas as execuções, serão avaliados: valor de caminho mínimo médio (L), coeficiente de agrupamento (C), coeficiente ω , o valor de avaliação da tarefa de classificação de densidade (DCT) dos indivíduos e o número de passos de tempo necessários para obtenção da resposta à DCT .

A seguir, pode-se ver um resumo dos resultados obtidos:

| <i>Execução</i> | <i>p</i> | <i>faixa de ω</i> | <i>Binomial</i> | | <i>Nearly Balanced</i> | |
|-----------------|----------|-------------------------------------|-----------------|----------------|------------------------|----------------|
| | | | ω | <i>DCT (%)</i> | ω | <i>DCT (%)</i> |
| 1 | 0,00000 | [-0,75, -0,50] | -0,503 | 0,2 | -0,731 | 0 |
| 2 | 0,00267 | [-0,50, -0,25] | -0,250 | 0,3 | -0,497 | 0 |
| 3 | 0,00969 | [-0,25, 0,00] | -0,001 | 0,7 | -0,243 | 0 |
| 4 | 0,02710 | [0,00, 0,25] | 0,248 | 3,6 | 0,249 | 0,2 |
| 5 | 0,05320 | [0,25, 0,50] | 0,500 | 28,4 | 0,497 | 2,2 |
| 6 | 0,08965 | [0,50, 0,75] | 0,750 | 79,6 | 0,750 | 38,5 |
| 7 | 0,14500 | [0,75, 1,00] | 0,936 | 88,2 | 0,883 | 52,6 |

Tabela 2: Resultados encontrados na busca evolutiva de topologias.

A seguir, nas Figuras 18 e 19, pode-se observar as topologias dos melhores indivíduos ao final das 7 execuções, tanto para as distribuições do tipo binomial e *nearly balanced*. A medida que ω é incrementado, nota-se visualmente cada vez mais a presença de arestas reconectadas que atuam como atalho (Figura 8 - Seção 2.1.3), o que contribui para a facilitação da disseminação de informações pela rede, consequentemente melhorando a avaliação da *DCT*.



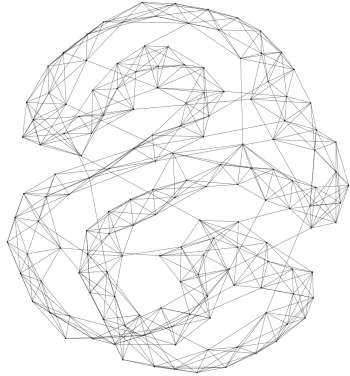
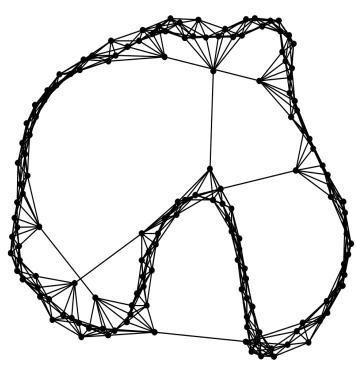
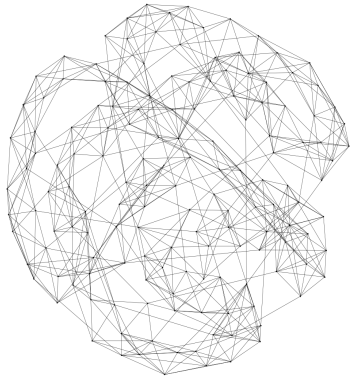
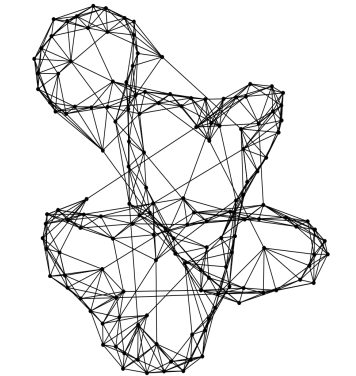
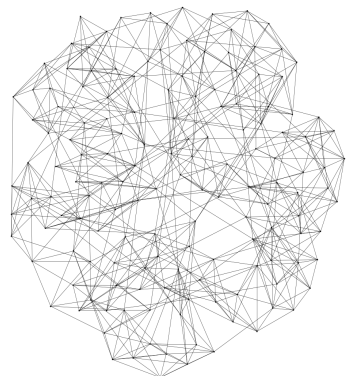
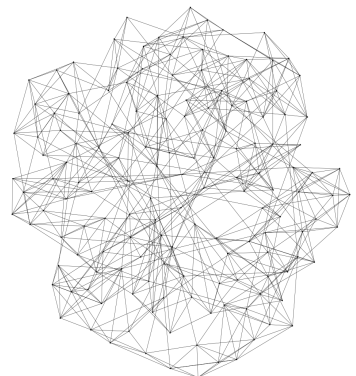
| Exec. | <i>Binomial</i> | | <i>Nearly Balanced</i> | |
|-------|-----------------|---|------------------------|---|
| | ω | Topologia | ω | Topologia |
| 1 | -0,503 |  | -0,731 |  |
| 2 | -0,250 |  | -0,497 |  |
| 3 | -0,001 |  | -0,243 |  |
| 4 | 0,248 |  | 0,249 |  |

Figura 18: Representações visuais para as redes com o melhor desempenho na *DCT* com distribuição binomial e *nearly balanced* nas execuções de 1 a 4.

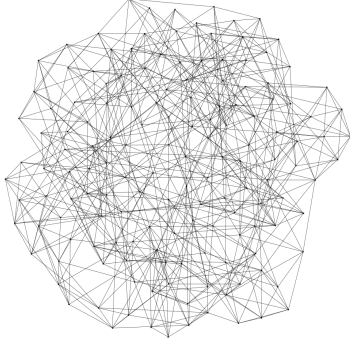
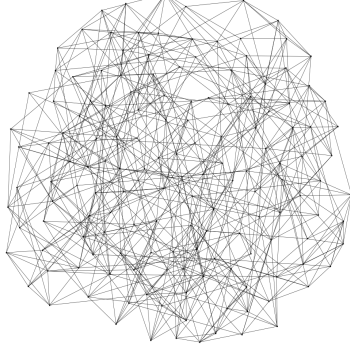
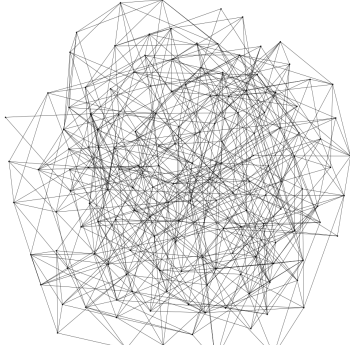
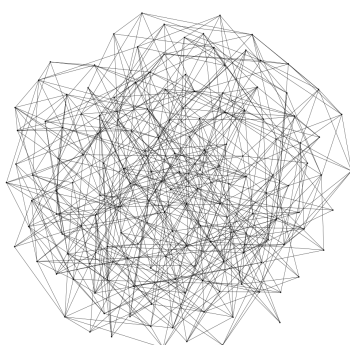
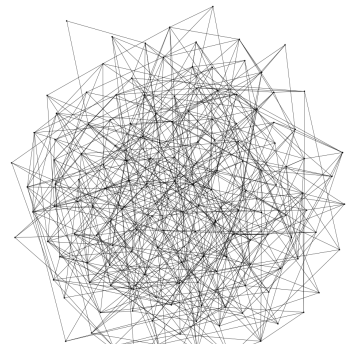
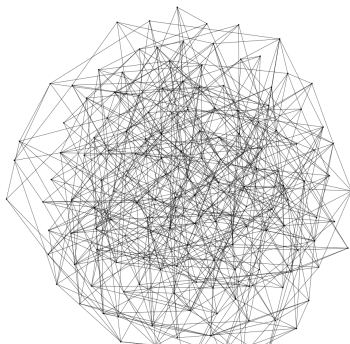
| Exec. | <i>Binomial</i> | | <i>Nearly Balanced</i> | |
|-------|-----------------|---|------------------------|---|
| | ω | Topologia | ω | Topologia |
| 5 | 0,500 |  | 0,497 |  |
| 6 | 0,750 |  | 0,750 |  |
| 7 | 0,936 |  | 0,883 |  |

Figura 19: Representações visuais para as redes com o melhor desempenho na *DCT* com distribuição binomial e *nearly balanced* nas execuções de 5 a 7.

Quanto a distribuição de condições iniciais do tipo binomial, verificam-se resultados de até 88,2% para a *DCT* (Tabela 2), sendo que a avaliação melhora conforme $\omega \rightarrow 1$, ou seja, valores de ω referentes a redes com características mais próximas das aleatórias, porém sem realmente serem em essência. Em todas as execuções, a topologia obtida ao final é mais robusta que a de uma rede aleatória. Isso acontece, pois ao se remover

aleatoriamente um nó ou aresta de uma rede com coeficiente de agrupamento maior, caso das redes com $\omega < 1$, a informação a ser transmitida pela rede encontra outra rota para se disseminar, contribuindo positivamente na avaliação da DCT.

Em todas as execuções, foram identificadas quedas de performance entre as gerações (Apêndices A.4 e B.4). Isso é devido a renovação total das condições iniciais a cada início de geração. Apesar dessa queda de performance entre as gerações, não houve comprometimento na obtenção de um valor convergente para a aptidão (*fitness*) do indivíduo.

Já para a distribuição do tipo *nearly balanced*, notam-se valores inferiores em termos comparativos com a distribuição do tipo binomial. Isso já era esperado pelo fato de ser a distribuição de condição inicial mais difícil para a tarefa de classificação de densidade (DE OLIVEIRA, 2014). Devido à essa característica, é possível notar que para as execuções 1, 2 e 3 o mecanismo evolutivo não consegue encontrar topologias suficientemente boas para melhorar a performance na DCT. Por isso, os valores de caminho mínimo médio (L), coeficiente de agrupamento (C), coeficiente ômega (ω), avaliação da DCT e o número de passos de tempo usados permanecem constantes para essas execuções.

Quanto ao caminho mínimo médio (L) dos experimentos com distribuição binomial, constata-se decréscimos em todas as execuções (Apêndice A.1). O mesmo nota-se para a distribuição do tipo *nearly balanced* (Apêndice B.1). Portanto, conclui-se que a disseminação de informação pelos nós das redes encontradas nessas execuções é efetuada em poucos passos.

Conforme já dito na Seção 3.2, o coeficiente de agrupamento (C) sofre acréscimos e decréscimos de acordo com as faixas de ω . Nos Apêndices A.2 e B.2, pode-se observar a tendência de decréscimos do coeficiente de agrupamento em todas as execuções, o que demonstra que a operação de mutação realmente favorece mais o decréscimo do que o acréscimo no coeficiente de agrupamento.

Nos Apêndices A.3 e B.3, nota-se que durante as execuções os valores de ômega (ω) tendem para o limite superior do intervalo, sendo que ao final de todas as execuções alcança-se o limite superior da faixa de ômega.

Quanto aos valores relativos à tarefa de classificação de densidade, nos Apêndices A.4 e B.4, pode-se verificar a evolução dos valores utilizando as distribuições do tipo binomial

e *nearly balanced* respectivamente. Já nos Apêndices A.5 e B.5, vê-se a evolução do número de passos de tempo necessários para avaliação da *DCT* com sucesso, onde nota-se a necessidade de poucos passos de tempo comparados aos $\eta = 2m$ passos de tempo utilizados como limite (vide Seção 2.4 para mais detalhes).

4.2 Evolução temporal da Tarefa de Classificação de Densidade *DCT*

Nos Apêndices A.5 e B.5 verifica-se em todas as execuções a necessidade de um número pequeno de passos de tempo para se obter um valor correto da *DCT*, valores esses inferiores aos $\eta = 2m$ passos de tempo utilizados como limite. Abaixo, vê-se a evolução temporal da rede Booleana para os casos em que a *DCT* é avaliada com sucesso:

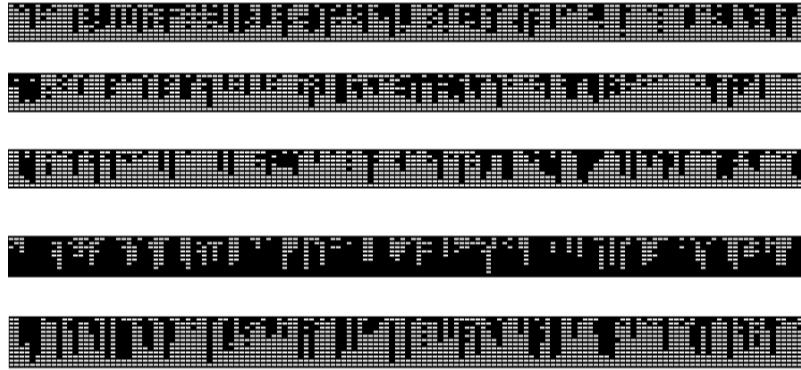


Figura 20: Exemplo de 5 evoluções temporais para *DCT* avaliadas com sucesso.

Uma outra característica é a que o processamento do autômato alcança o valor de $\eta = 2m$ passos de tempo apenas nos casos em que a *DCT* falha. A razão disso ocorrer é que estamos utilizando a regra da maioria (vide a Seção 3.2 para mais detalhes), que é uma regra limitada e não proporciona uma boa evolução temporal dos valores. Isso fica evidente nos blocos de estados que permanecem fixos durante toda a evolução temporal do autômato celular, não permitindo a convergência para um ponto fixo:

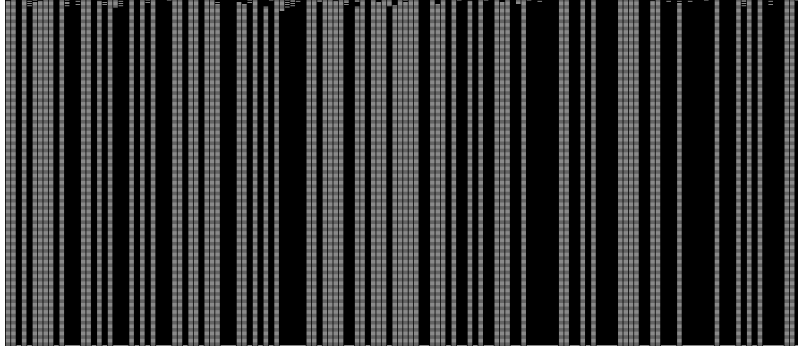


Figura 21: Exemplo de evolução temporal para DCT avaliada com falha.

Há casos em que o estado fixo emerge, porém com o inverso do esperado:

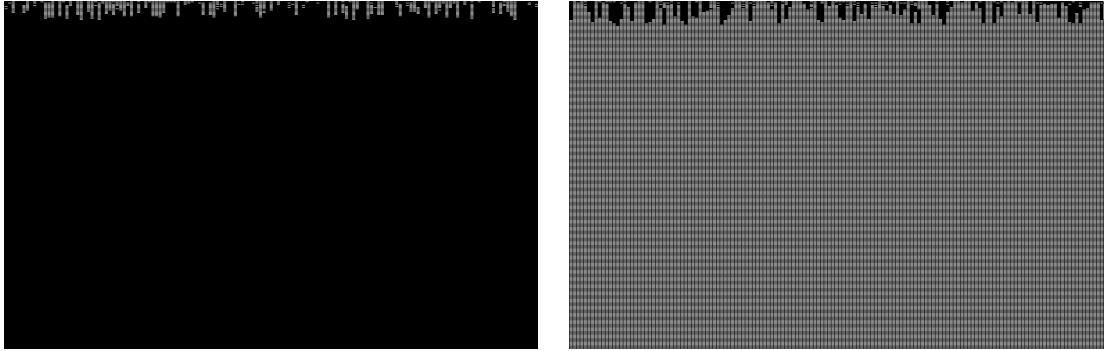


Figura 22: Exemplo de 2 evoluções temporais com estado final fixo para DCT com falha.

4.3 Busca evolutiva de regras

Conforme os resultados apresentados nas Seções 4.1 e 4.2, a busca evolutiva por topologias utilizando exclusivamente a regra da maioria encontra em determinado momento uma limitação, não conseguindo encontrar valores melhores para a avaliação da DCT . De modo a superar isso, efetua-se um processo de busca evolutiva a partir da regra da maioria da vizinhança, utilizando as topologias de redes encontradas no primeiro experimento (Seção 4.1). As regras serão representadas por sequências de bits, obedecendo a representação lexicográfica sugerida em (WOLFRAM, 1984). Como estamos lidando com vizinhanças irregulares, cada tamanho de vizinhança será representada por uma sequência de bits, permitindo assim a evolução de cada tamanho específico de vizinhança.

Diferente do primeiro experimento, os indivíduos desta vez passam por cruzamento, onde obtêm-se todas as combinações possíveis de pares de indivíduos e para cada com-

binação escolhe-se aleatoriamente um único ponto na sequência de bits para efetuar o cruzamento. No processo de mutação, cada um dos bits sofre uma inversão de valor (*flip*) condicionada à uma probabilidade de 0.1%.

Como podemos ver na Tabela 3, a busca evolutiva de regras se mostrou efetiva na melhoria de performance na tarefa de classificação de densidade nas redes obtidas pelo primeiro experimento, tanto para a distribuição do tipo binomial quanto para *nearly balanced*. Quanto às execuções que utilizaram a distribuição de condições iniciais do tipo binomial, nota-se a melhoria de performance mais substancial na execução que utilizou uma rede com $\omega = 0,5$, onde observa-se a transição do valor de performance de 28,4% no primeiro experimento, para 85,8% neste segundo experimento. A mesma rede com $\omega = 0,5$, apresentou melhoria de performance substancial na classificação de densidade para a distribuição do tipo *nearly balanced*, indo do valor de 2,2% no primeiro experimento para 54,1% neste segundo experimento. Todos os gráficos de evolução da avaliação da *DCT* para todas as execuções referentes as distribuições do tipo binomial e *nearly balanced* podem ser observados respectivamente no Apêndice C.1 e Apêndice C.2.

| <i>Execução</i> | <i>Binomial</i> | | | <i>Nearly Bal.</i> | | |
|-----------------|-----------------|----------------|---------------|--------------------|----------------|---------------|
| | ω | <i>DCT (%)</i> | | ω | <i>DCT (%)</i> | |
| | | <i>antes</i> | <i>depois</i> | | <i>antes</i> | <i>depois</i> |
| 1 | -0,503 | 0,2 | 52,9 | -0,731 | 0 | 54,8 |
| 2 | -0,250 | 0,3 | 53,8 | -0,497 | 0 | 53,4 |
| 3 | -0,001 | 0,7 | 53,1 | -0,243 | 0 | 54,9 |
| 4 | 0,248 | 3,6 | 53,6 | 0,249 | 0,2 | 54,0 |
| 5 | 0,500 | 28,4 | 85,8 | 0,497 | 2,2 | 54,1 |
| 6 | 0,750 | 79,6 | 88,8 | 0,750 | 38,5 | 61,0 |
| 7 | 0,936 | 88,2 | 89,5 | 0,883 | 52,6 | 62,0 |

Tabela 3: Resultados antes e depois das execuções da busca evolutiva de regras.

4.4 Teste de esforço da *DCT* nos melhores indivíduos

A partir dos experimentos anteriores, efetua-se um teste de esforço da *DCT* nos melhores indivíduos encontrados. Os resultados podem ser vistos na Tabela 4, onde para

cada indivíduo foram testadas 1.000.000 de condições iniciais com distribuição binomial e *nearly-balanced*, procurando assim identificar o quão consistentes são os resultados obtidos nos experimentos.

Já eram esperadas reduções de performance em todos os indivíduos, visto que o teste de esforço utiliza 1.000.000 de condições iniciais, um valor superior às 1000 condições iniciais utilizadas nos experimentos. Quanto ao teste de esforço nos indivíduos encontrados pela busca evolutiva de topologias, notam-se variações mais acentuadas nos indivíduos com performance $\leq 50\%$, ou seja, uma performance inferior ao ato de escolher aleatoriamente entre os estados 0 e 1. Já nos indivíduos com performance superior a 50% notam-se reduções menores de performance entre 4,23% e 10,46%. Quanto ao teste de esforço nos indivíduos encontrados pela busca evolutiva de regras, notam-se variações entre 4,34% e 10,13%.

Busca Evolutiva de Topologias

| ω | <i>Binomial (%)</i> | | | ω | <i>Nearly Bal. (%)</i> | | |
|----------|---------------------|---------------|-----------------|----------|------------------------|---------------|-----------------|
| | <i>antes</i> | <i>depois</i> | <i>variação</i> | | <i>antes</i> | <i>depois</i> | <i>variação</i> |
| -0,503 | 0,2 | 0,0095 | -95,25 | -0,731 | 0 | 0 | 0 |
| -0,250 | 0,3 | 0,0267 | -91,10 | -0,497 | 0 | 0 | 0 |
| -0,001 | 0,7 | 0,1065 | -84,79 | -0,243 | 0 | 0 | 0 |
| 0,248 | 3,6 | 1,8039 | -49,89 | 0,249 | 0,2 | 0,0015 | -99,25 |
| 0,500 | 28,4 | 24,2732 | -14,53 | 0,497 | 2,2 | 1,0218 | -53,55 |
| 0,750 | 79,6 | 75,6350 | -4,98 | 0,750 | 38,5 | 33,5844 | -12,77 |
| 0,936 | 88,2 | 84,4725 | -4,23 | 0,883 | 52,6 | 47,0992 | -10,46 |

Tabela 4: Resultados antes e depois do teste de esforço da *DCT* para os melhores indivíduos obtidos pela busca evolutiva de topologias.

Busca Evolutiva de Regras

| ω | <i>Binomial (%)</i> | | | ω | <i>Nearly Bal. (%)</i> | | |
|----------|---------------------|---------------|-----------------|----------|------------------------|---------------|-----------------|
| | <i>antes</i> | <i>depois</i> | <i>variação</i> | | <i>antes</i> | <i>depois</i> | <i>variação</i> |
| -0,503 | 52,9 | 50,0435 | -5,40 | -0,731 | 54,8 | 50,0017 | -8,76 |
| -0,250 | 53,8 | 50,0018 | -7,06 | -0,497 | 53,4 | 49,9969 | -6,37 |
| -0,001 | 53,1 | 50,0354 | -5,77 | -0,243 | 54,9 | 49,9693 | -8,98 |
| 0,248 | 53,6 | 50,0869 | -6,55 | 0,249 | 54,0 | 50,0217 | -7,37 |
| 0,500 | 85,8 | 82,0799 | -4,34 | 0,497 | 54,1 | 50,0681 | -7,45 |
| 0,750 | 88,8 | 84,1779 | -5,21 | 0,750 | 61,0 | 55,6484 | -8,77 |
| 0,936 | 89,5 | 85,3244 | -4,67 | 0,883 | 62,0 | 55,7184 | -10,13 |

Tabela 5: Resultados antes e depois do teste de esforço da *DCT* para os melhores indivíduos obtidos pela busca evolutiva de regras.

Capítulo 5

Considerações Finais

Neste trabalho, avaliou-se de maneira sistemática o uso do coeficiente ω como parâmetro em buscas evolutivas de topologias de rede aplicáveis à tarefa de classificação de densidade, e os resultados evidenciam que o uso do indicador ω mostrou-se eficaz na exploração do vasto espaço de topologias, sendo mais assertivo do que a simples observação dos valores de caminho mínimo médio (L) e coeficiente de agrupamento (C). Uma possível extensão desta abordagem é a avaliação de diferentes valores de $C_{reticulado}$, visto que esse valor funciona como referência (*benchmarking*) no cálculo do valor de ω .

O número de passos de tempo necessários para se obter um valor correto na tarefa de classificação de densidade foram inferiores aos $\eta = 2m$ passos de tempo utilizados como limite (vide Apêndices A.5 e B.5). O valor de $\eta = 2m$ passos de tempo é alcançado apenas nos casos em que a *DCT* falha, e a razão disso ocorrer é que em determinados momentos a transferência de informações de densidade pela rede fica comprometida devido a alguma particularidade da topologia ou da regra de avaliação de estados (função Booleana). Isso fica evidente nos blocos de estados que permanecem fixos durante toda a evolução temporal (Seção 4.2), não permitindo a convergência para um estado fixo.

Ao executar-se a busca evolutiva de regras, a partir da regra da maioria da vizinhança, encontraram-se regras com uma melhora substancial de performance na *DCT*, demonstrando que a busca evolutiva de topologias sucedida pela busca evolutiva de regras é efetiva. Após isso, realizou-se uma pequena alteração no mecanismo evolutivo, combinando na mesma execução a evolução alternada de topologias e regras a cada nova geração. Essa pequena incursão não se mostrou proveitosa, pois a evolução de uma topologia implica na alteração das vizinhanças dos nós. Isso invalida a configuração da sequência de bits corrente que representa a regra, afetando assim a convergência dos valores de aptidão (*fitness*) do indivíduos. Portanto, a abordagem de dividir a evolução de topologias e regras em dois experimentos mostra-se mais adequada.

Quanto aos valores de aptidão (*fitness*) encontrados na busca evolutiva de topolo-

gias, podemos afirmar que o mecanismo evolutivo combinado com a métrica ômega (ω) superou o valor de 82,3% encontrado no estudo realizado por Chira e Andreica (2014), encontrando um valor de 84,47% na avaliação da *DCT* (vide Tabela 2). Devido a natureza probabilística da adição de arestas do experimento realizado por Chira e Andreica (2014), não é possível colocar em total comparação ambos os experimentos. Portanto, sugere-se como extensão o aperfeiçoamento do mecanismo evolutivo deste trabalho, com adição e remoção de arestas condicionadas à uma determinada probabilidade.

Quanto à topologia das redes com melhor performance encontradas (Figuras 18 e 19 - Seção 4.1), pode-se afirmar que tais topologias estão bem próximas dos espectro de redes aleatórias ($\omega = 1$), porém sem realmente serem em sua essência. Redes com $\omega < 1$ são mais robustas que redes aleatórias, conforme explicado na Seção 4.1, por isso são boas candidatas quando necessita-se de robustez e poder de disseminação de informações entre os nós.

Sugere-se como extensão, uma exploração do espaço de topologias livres de escala (*scale-free*), visto que a distribuição de graus de nós dos melhores indivíduos (Figuras (Figuras 18 e 19) - Seção 4.1) evidenciam um padrão assimétrico, possivelmente tendendo à distribuições regidas pela regra da potência (BARABASI; ALBERT, 1999).

Por fim, vale destacar que os resultados obtidos neste trabalho serviram de insumo para a edição de um artigo científico (DE MATTOS; DE OLIVEIRA, 2018), aceito pela 15ª conferência internacional DCAI (*Distributed Computing and Artificial Intelligence*) a ser realizada entre os dias 20 e 22 de Junho de 2018 na cidade de Toledo (Espanha).

Apêndice A - Experimento da Seção 4.1 (binomial)

A.1 Gráficos de Evolução do Caminho Mínimo Médio (L)

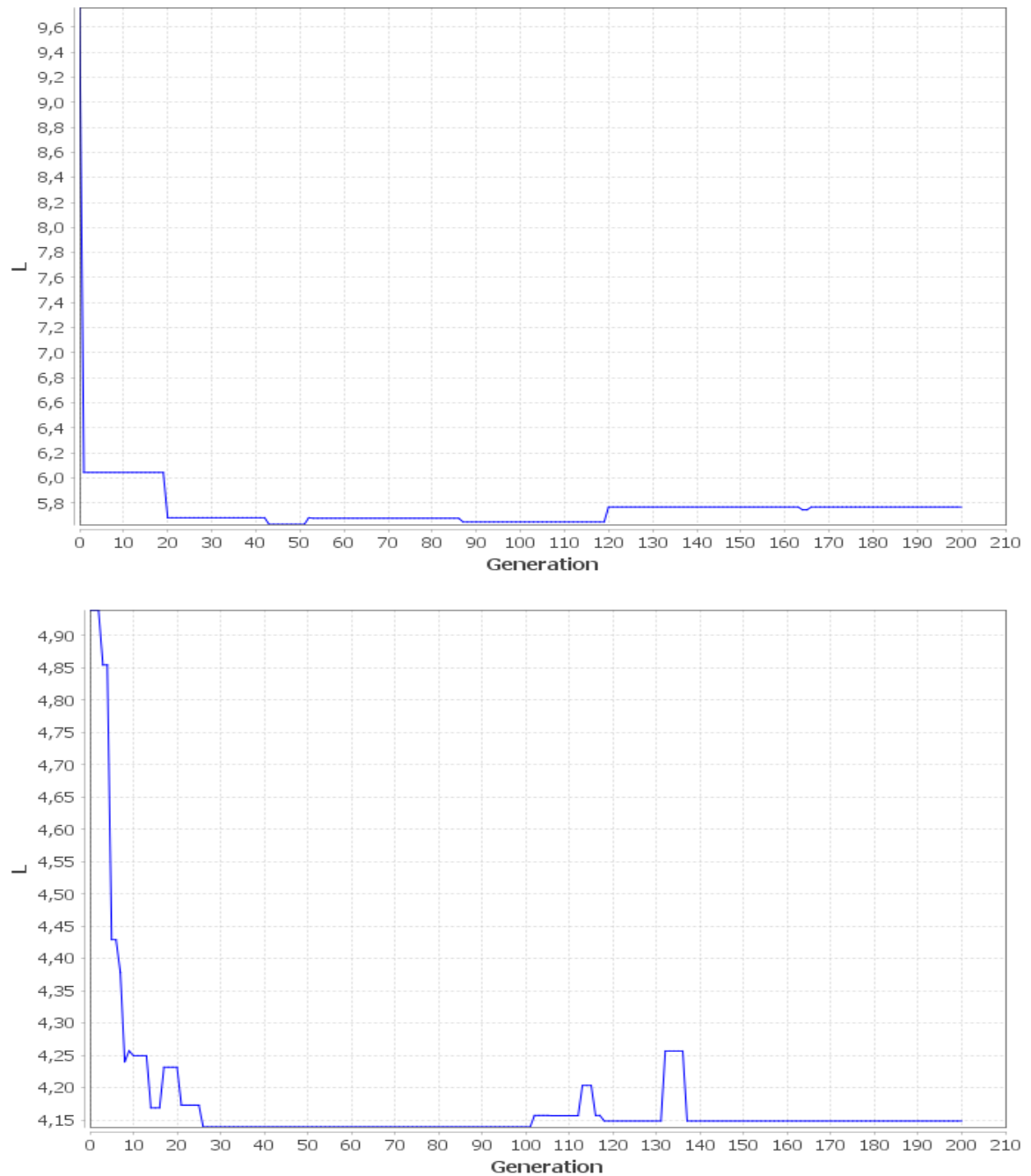


Figura 23: Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 1 e 2.

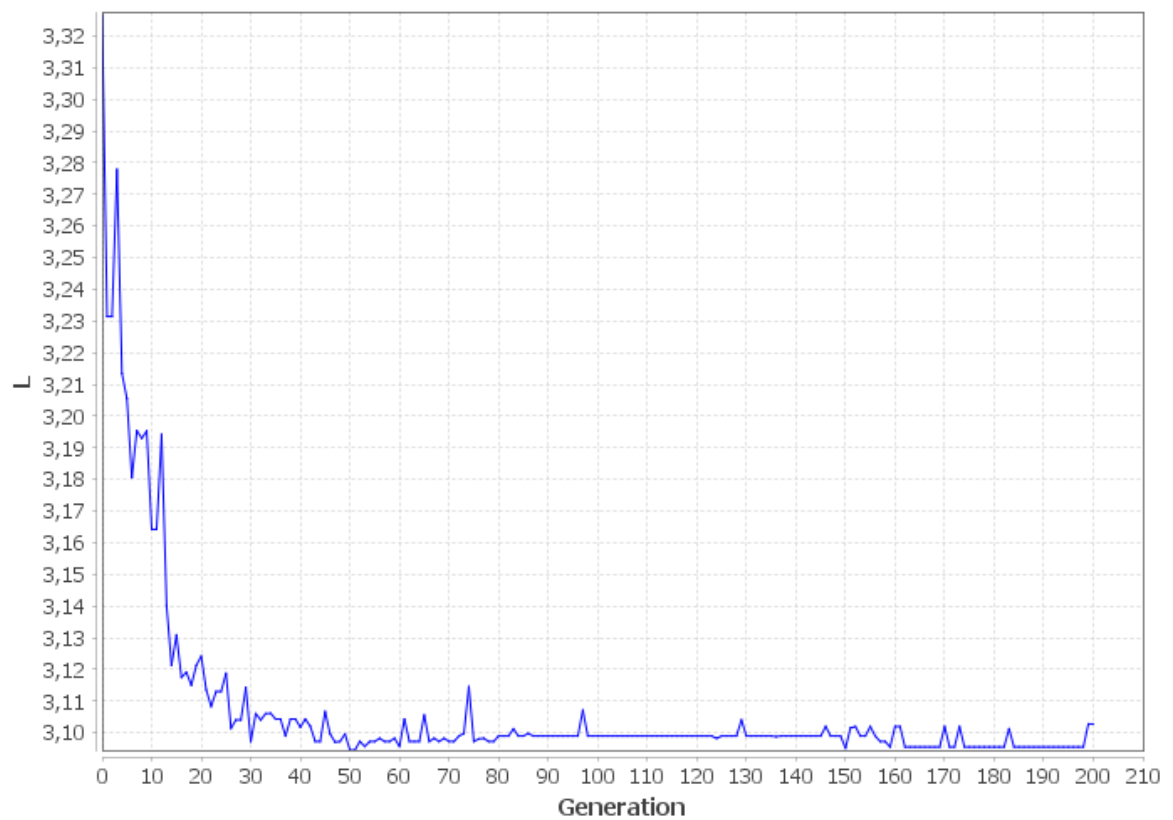
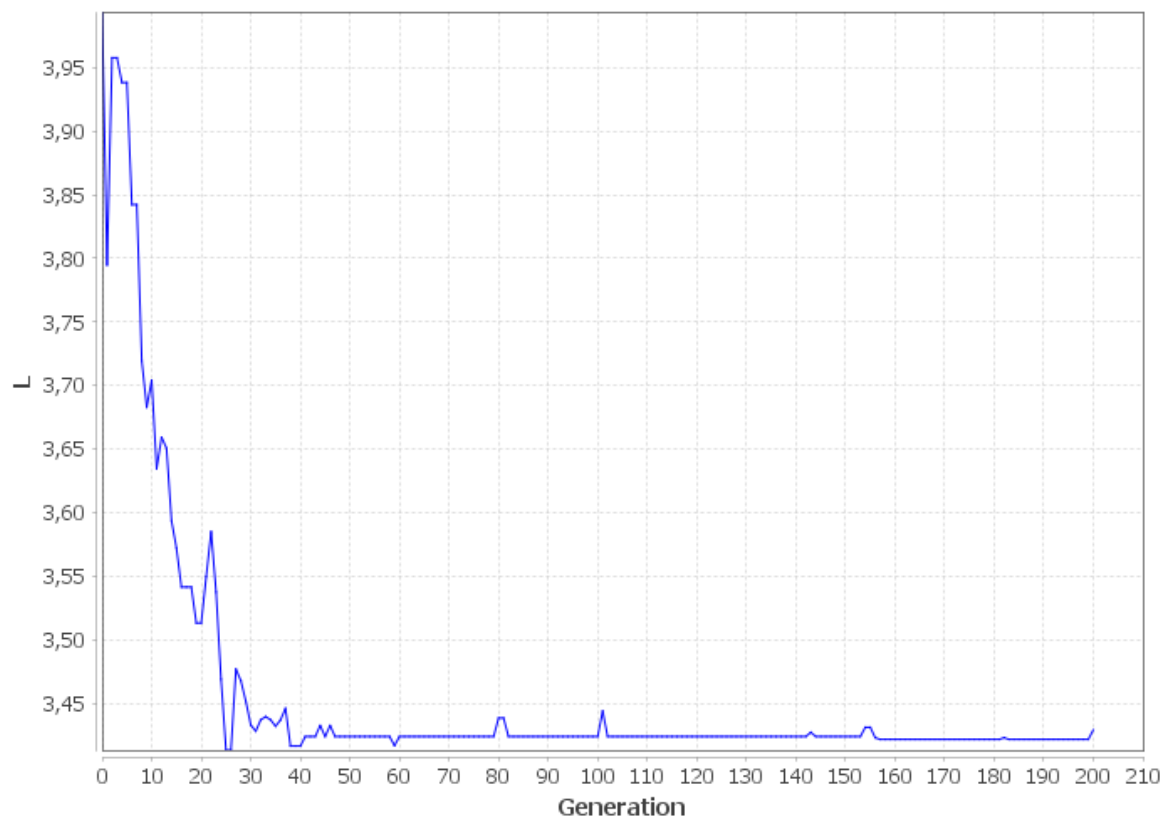


Figura 24: Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 3 e 4.

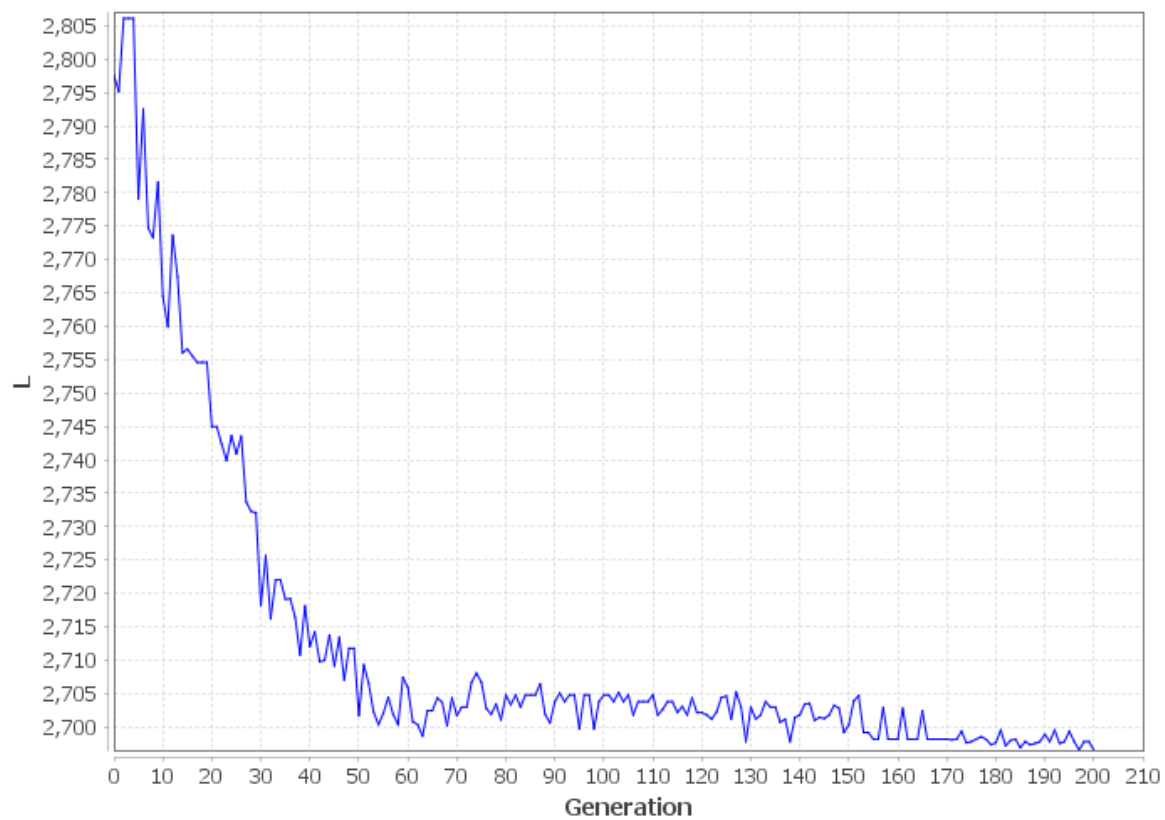
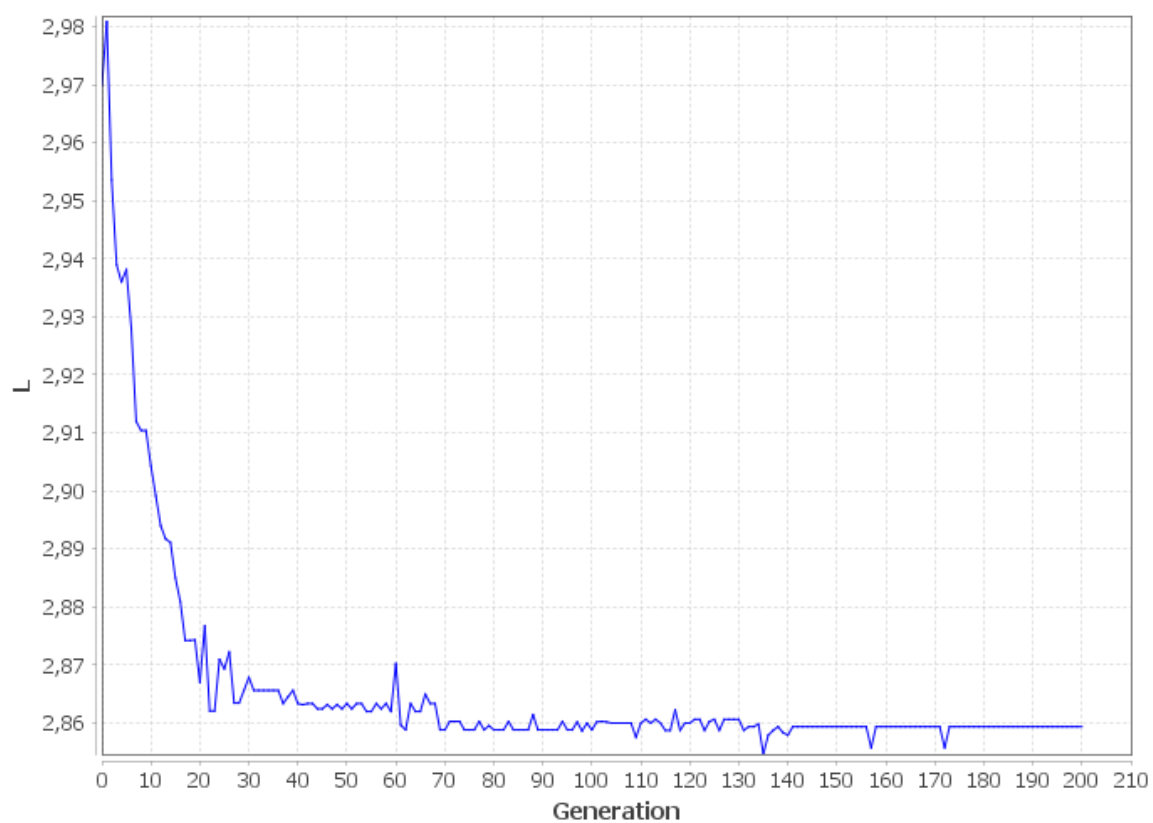


Figura 25: Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 5 e 6.

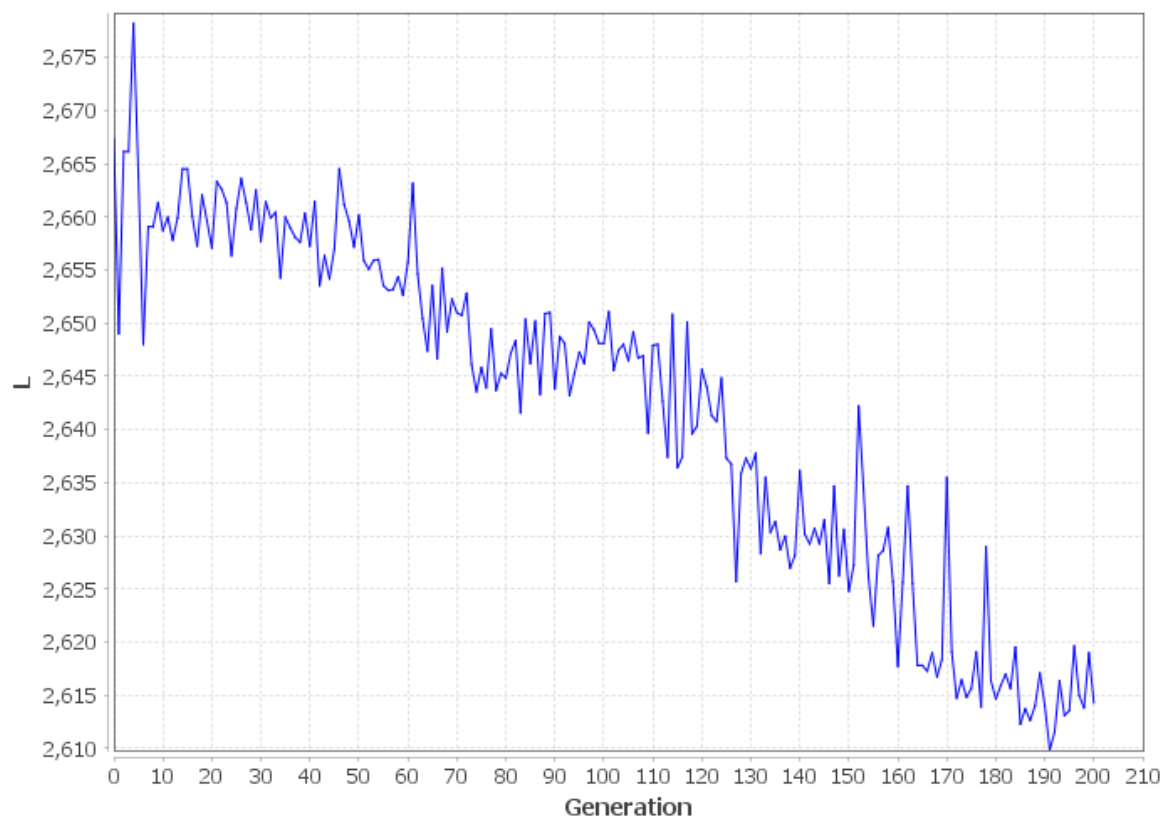


Figura 26: Evolução do caminho mínimo médio na execução 7.

A.2 Gráficos de Evolução do Coeficiente de Agrupamento (C)

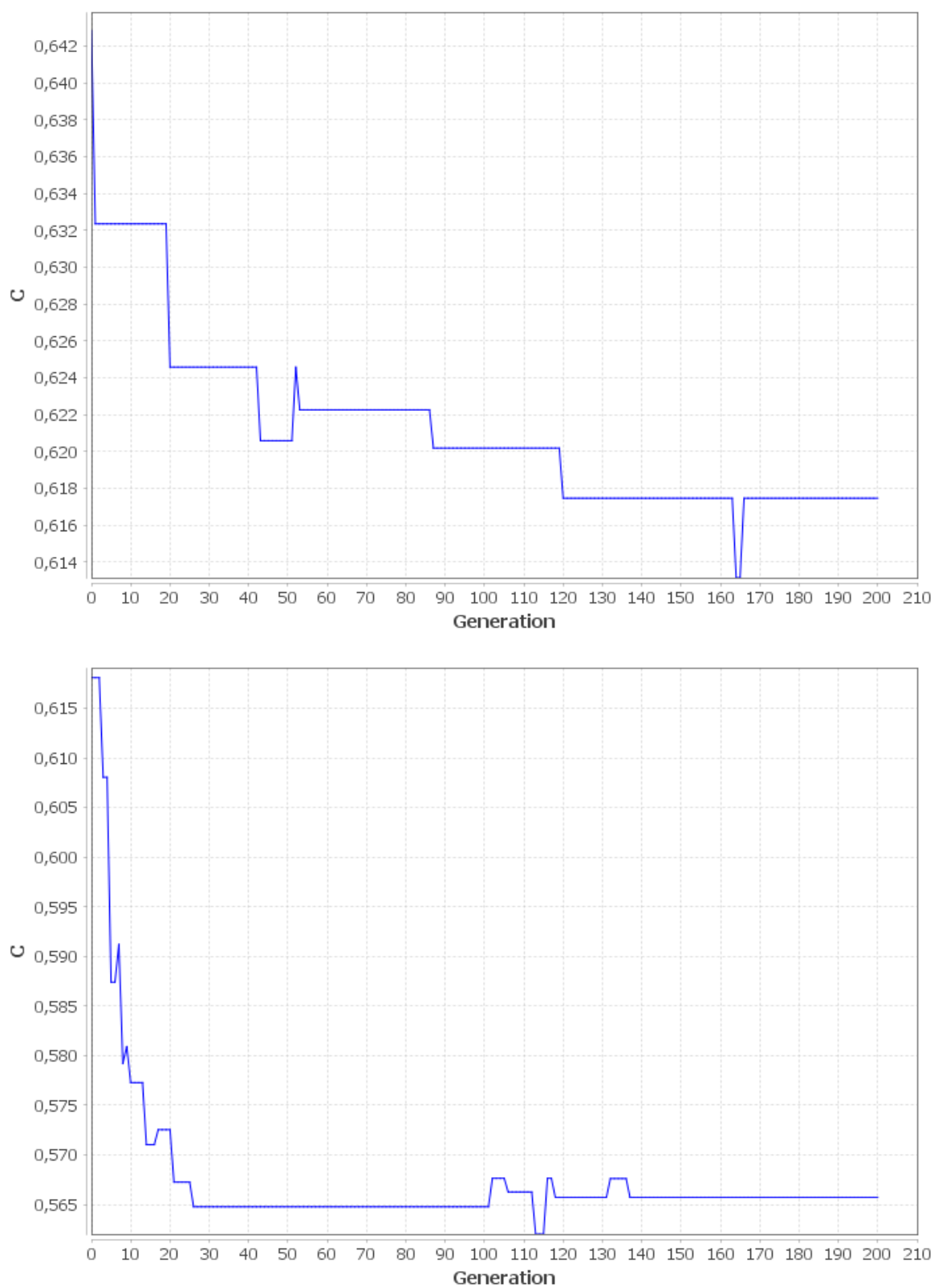


Figura 27: Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 1 e 2.

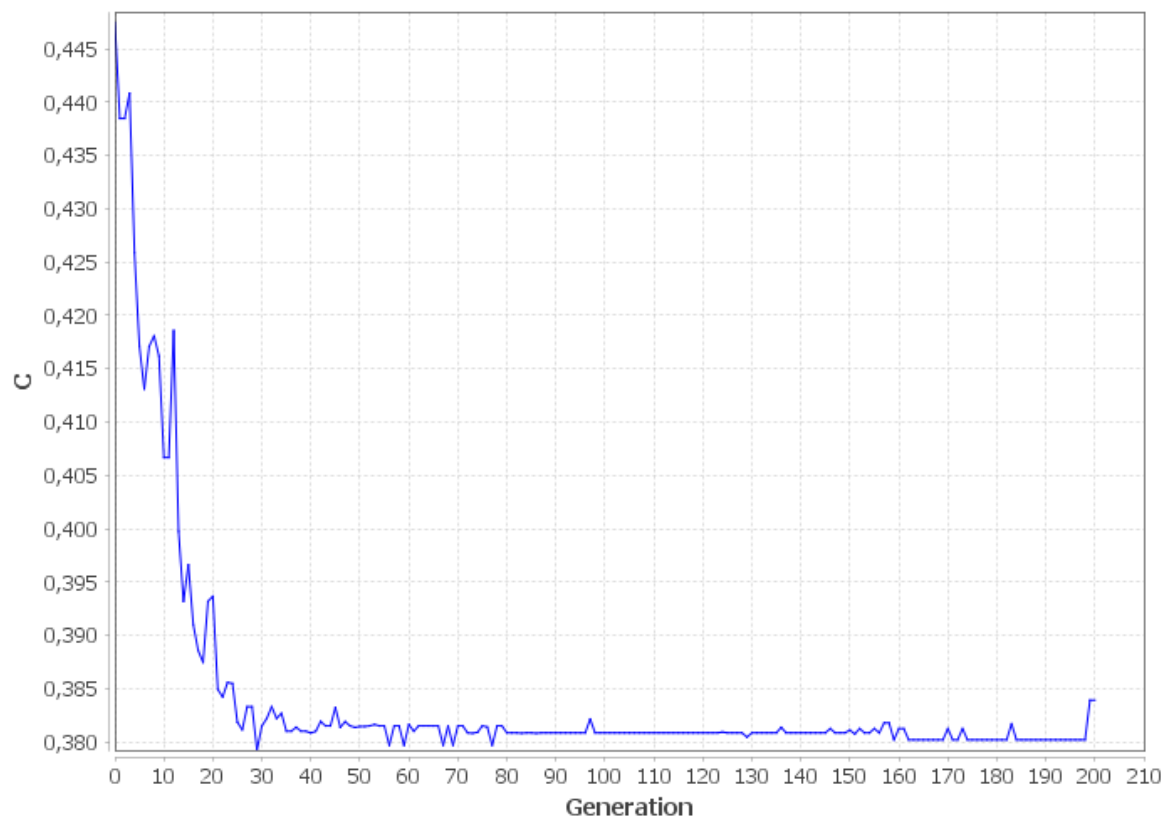
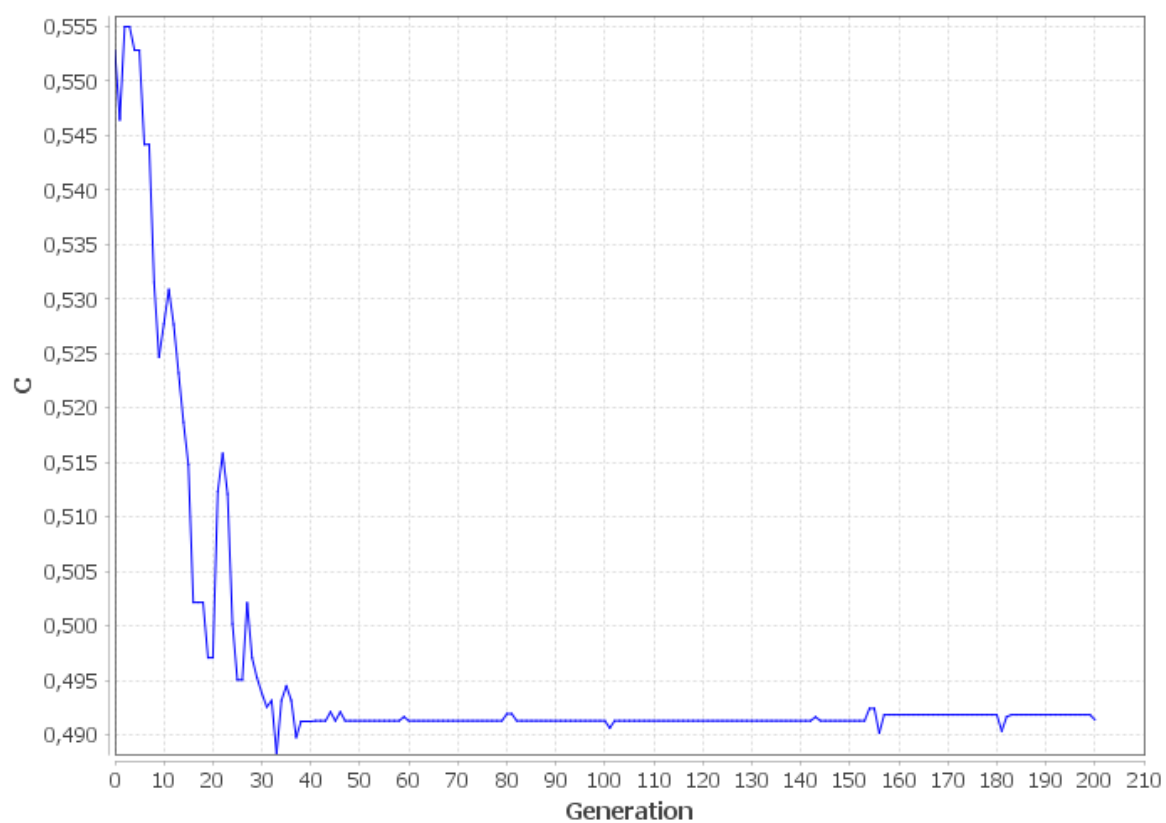


Figura 28: Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 3 e 4.

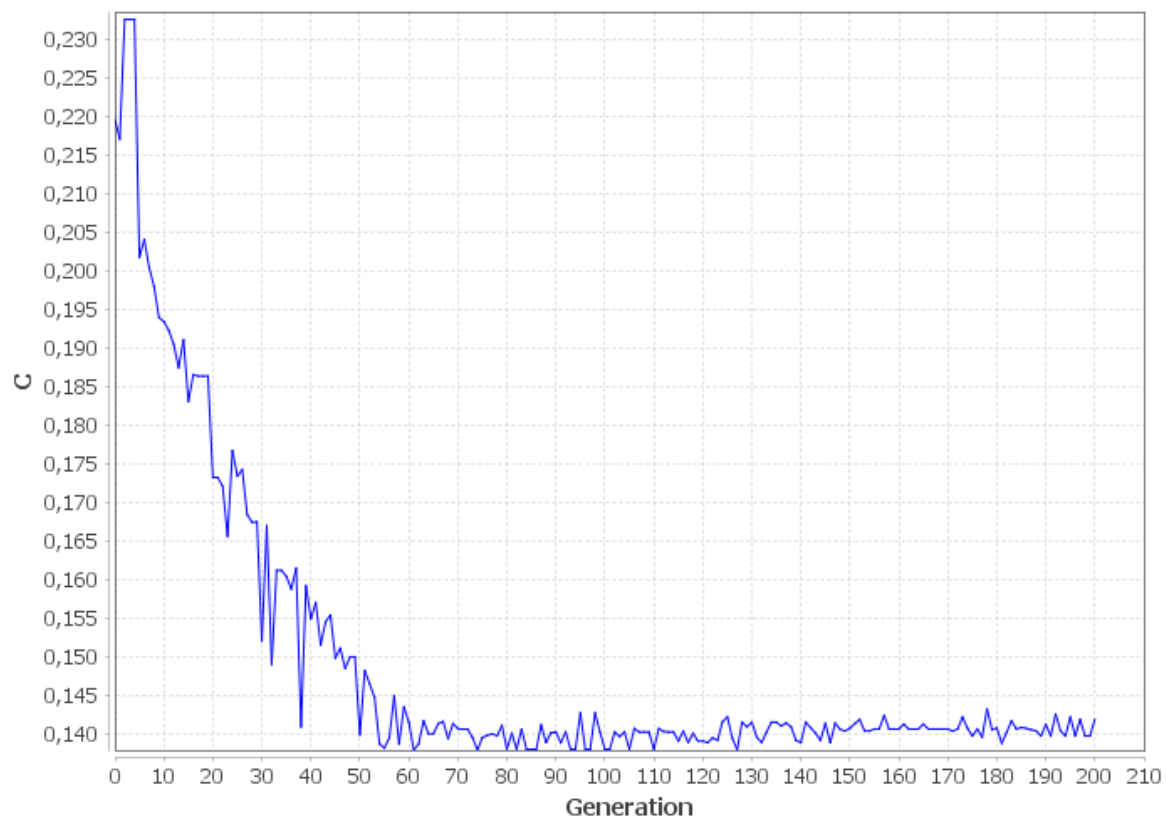
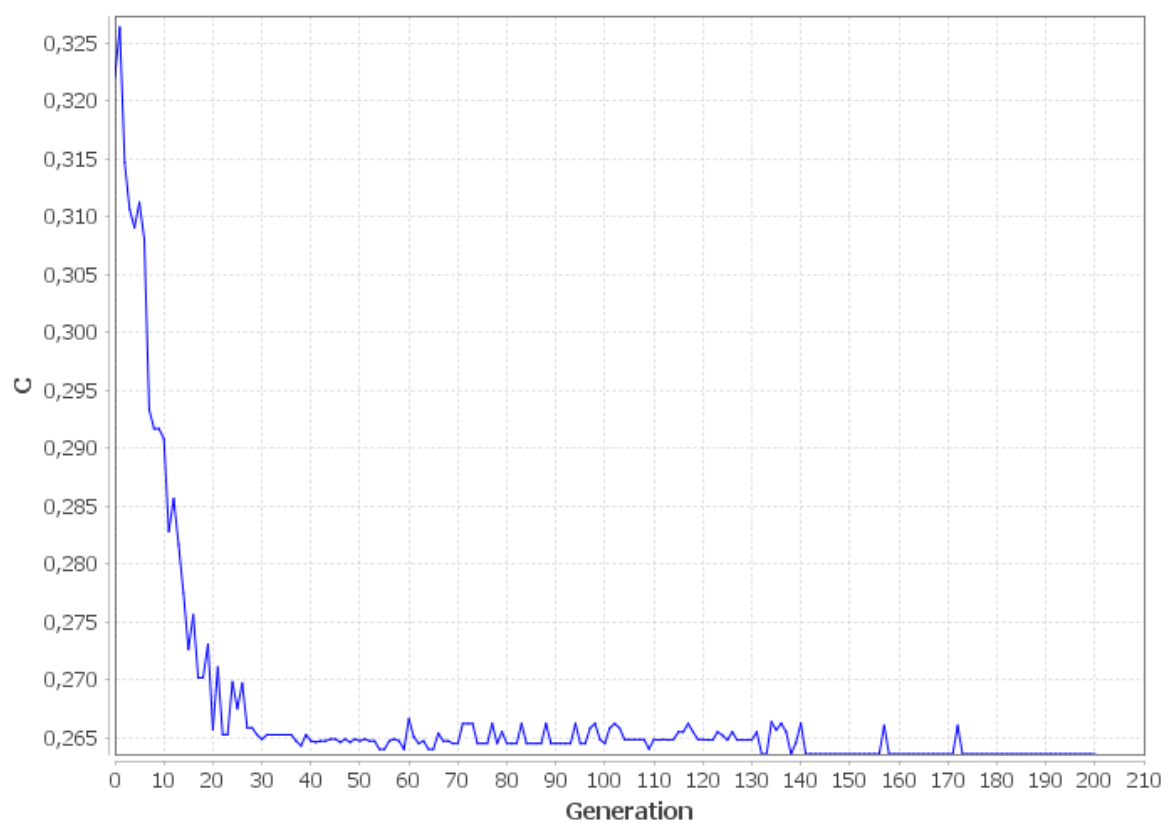


Figura 29: Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 5 e 6.

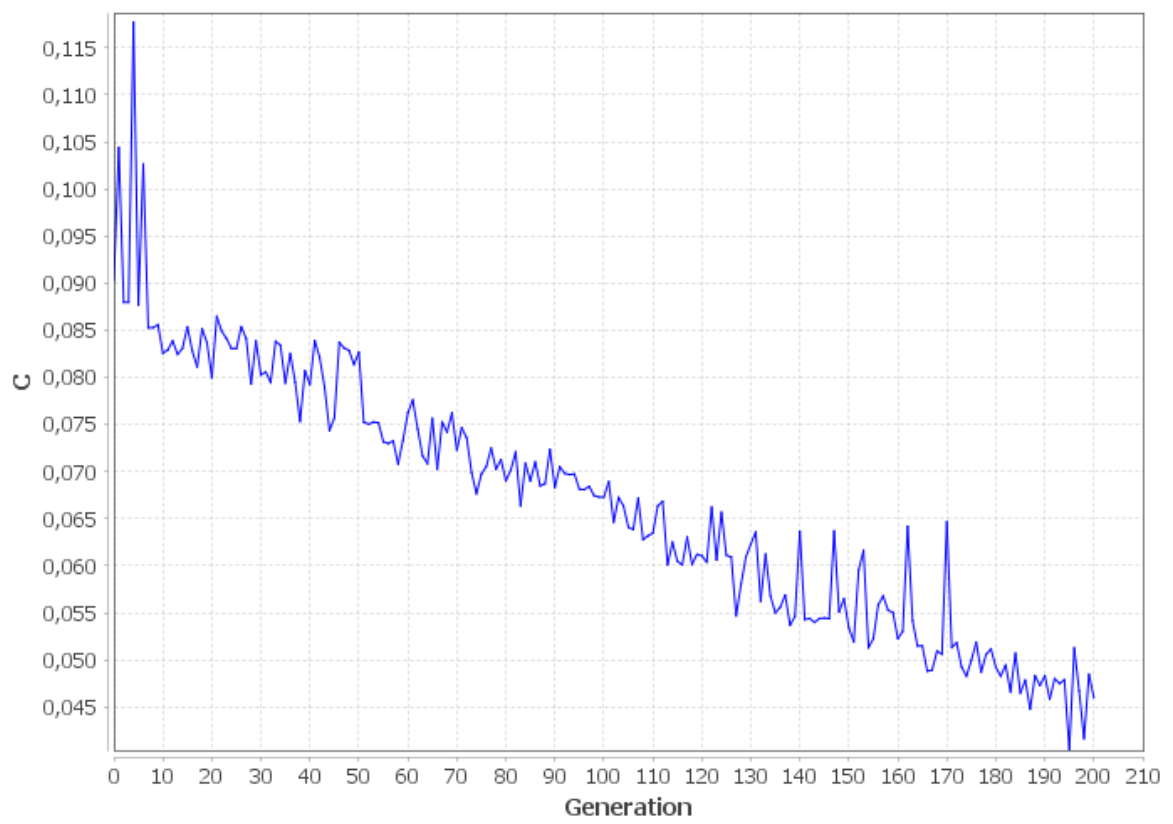


Figura 30: Evolução do coeficiente de agrupamento na execução 7.

A.3 Gráficos de Evolução do Coeficiente Ômega (ω)

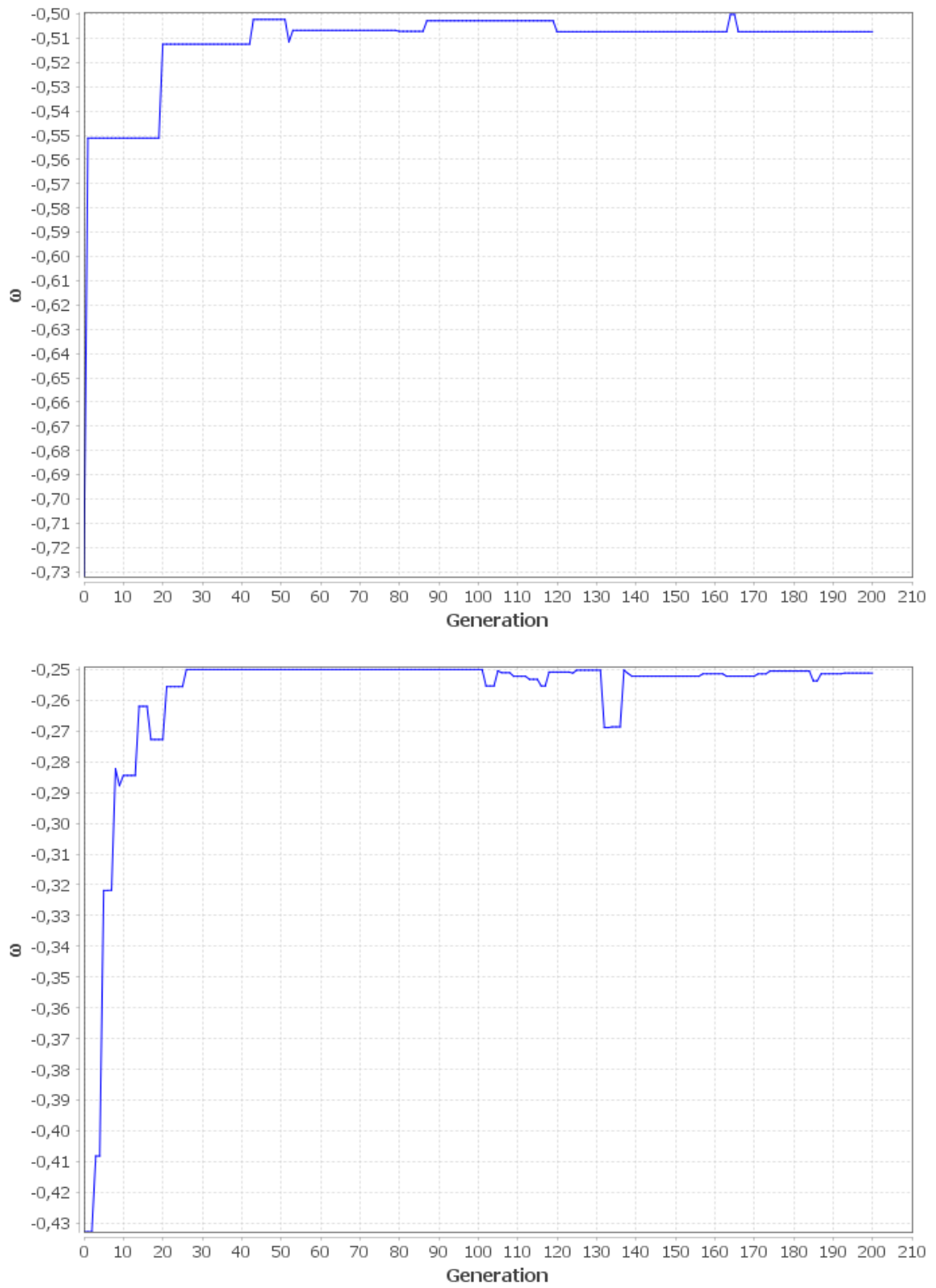


Figura 31: Evolução do coeficiente ômega nas execuções 1 e 2.

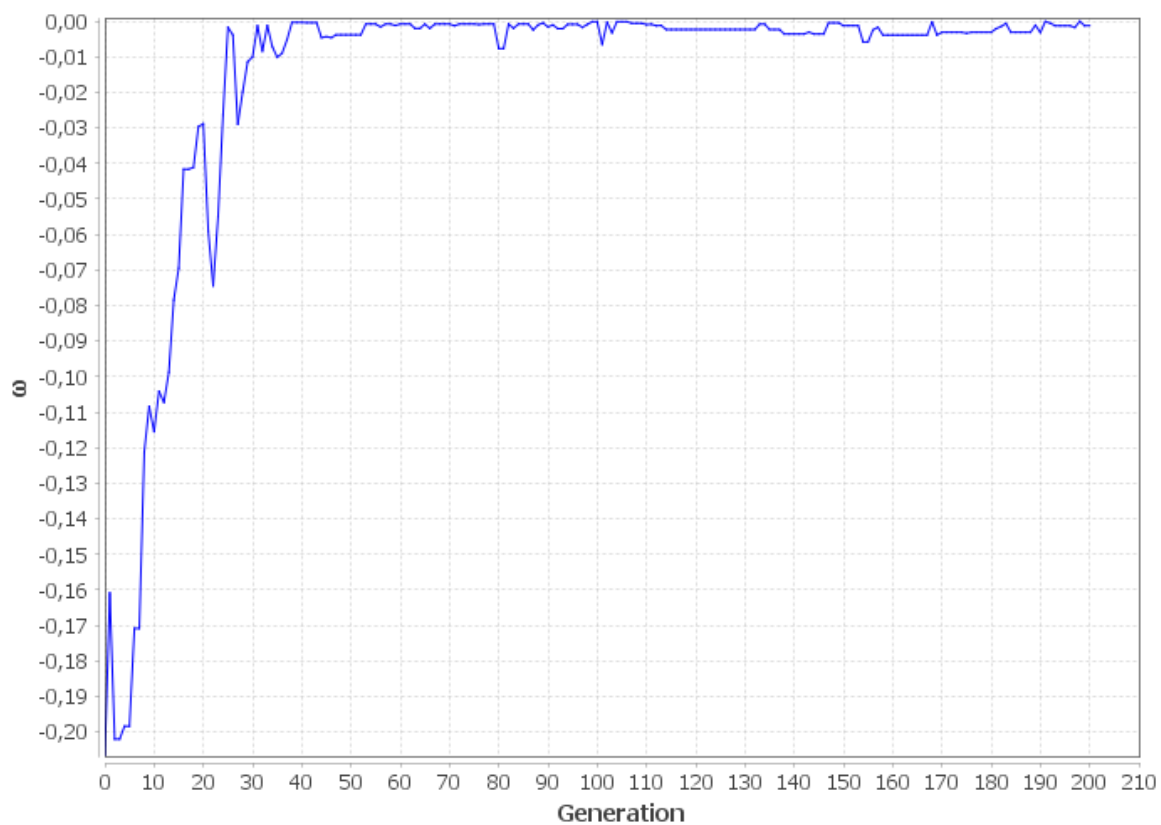


Figura 32: Evolução do coeficiente ω nas execuções 3 e 4.

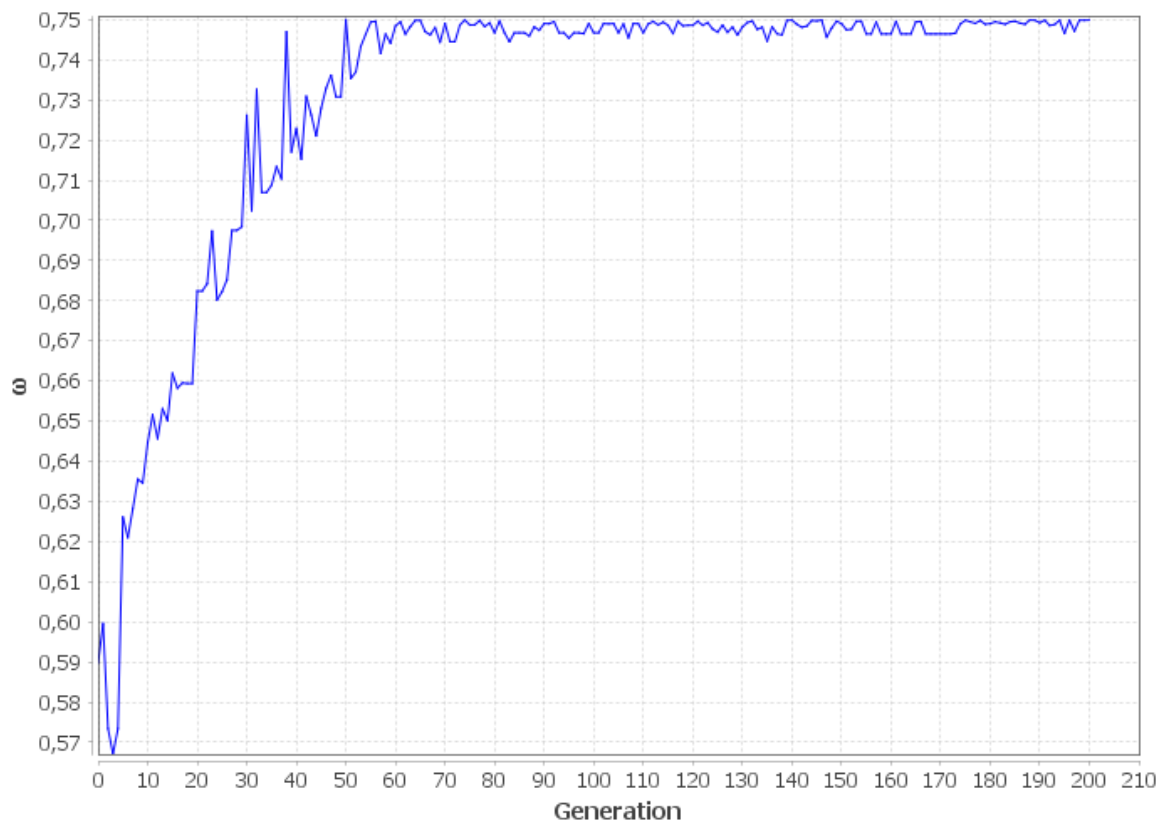
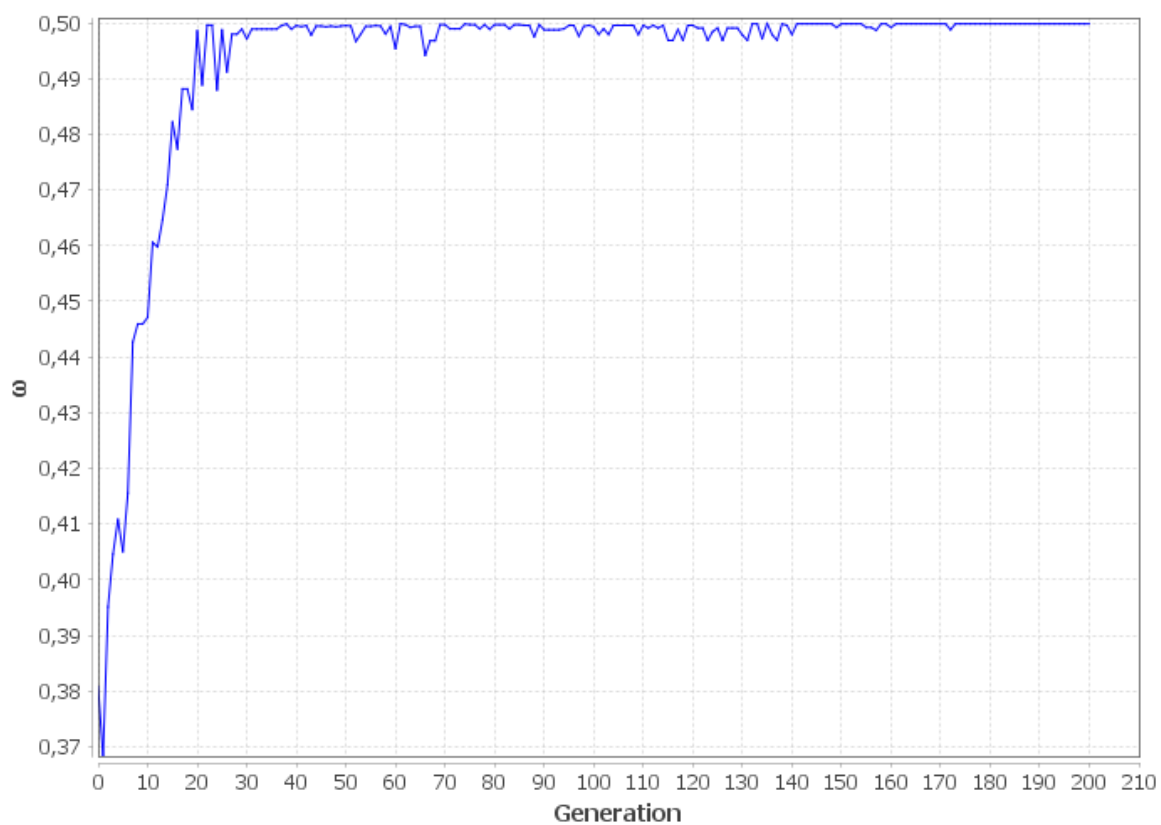


Figura 33: Evolução do coeficiente ω nas execuções 5 e 6.

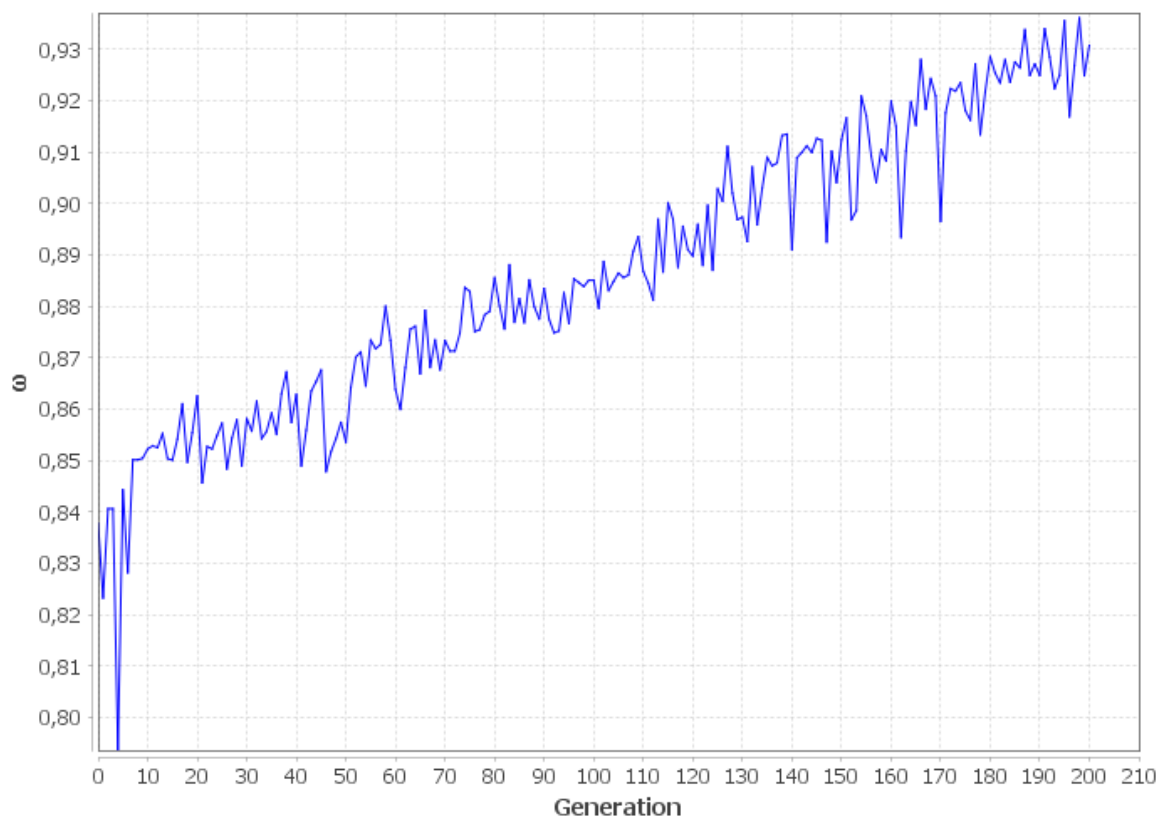


Figura 34: Evolução do coeficiente ω na execução 7.

A.4 Gráficos de Evolução da Avaliação da *DCT*

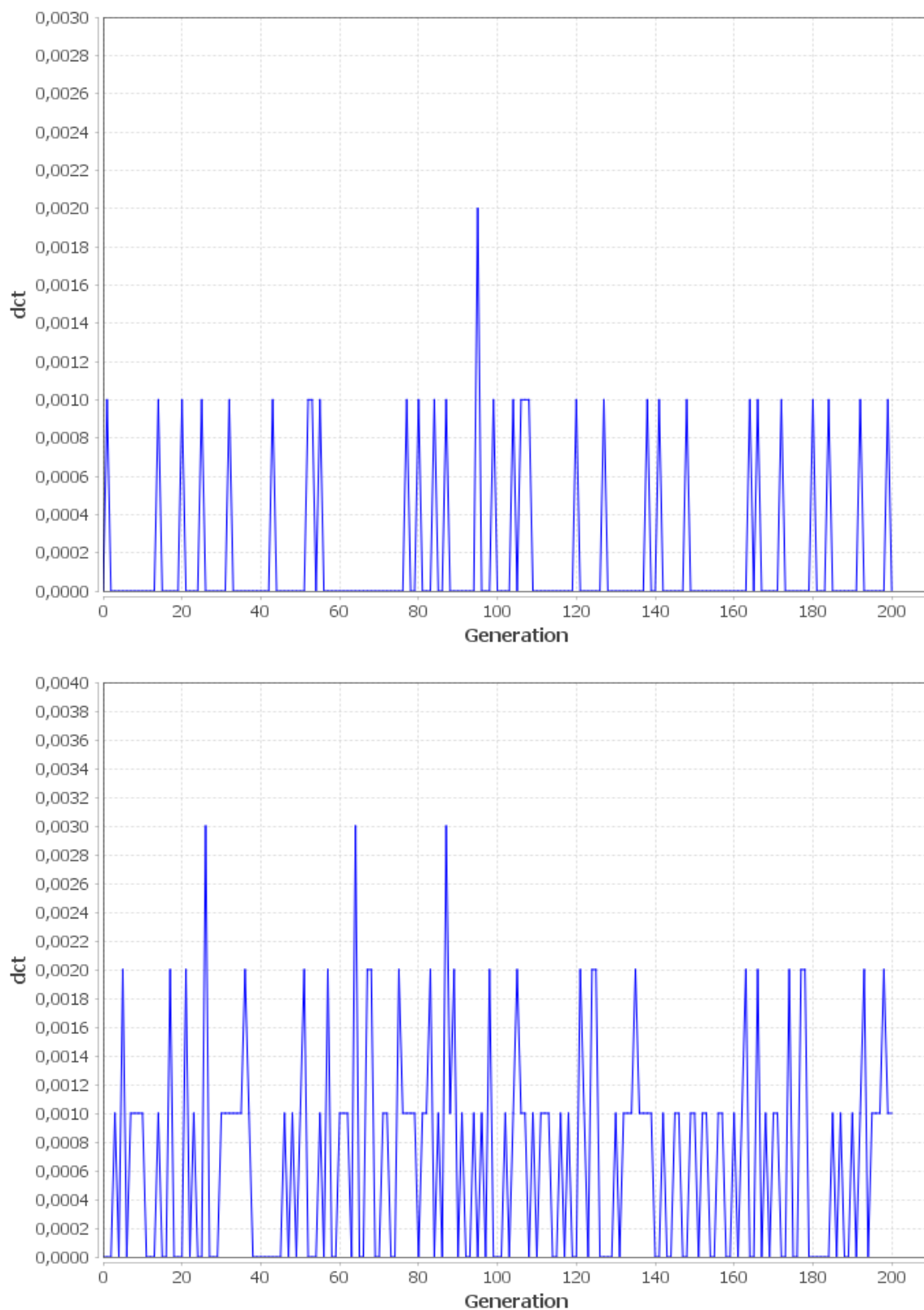


Figura 35: Evolução da avaliação da *DCT* nas execuções 1 e 2.

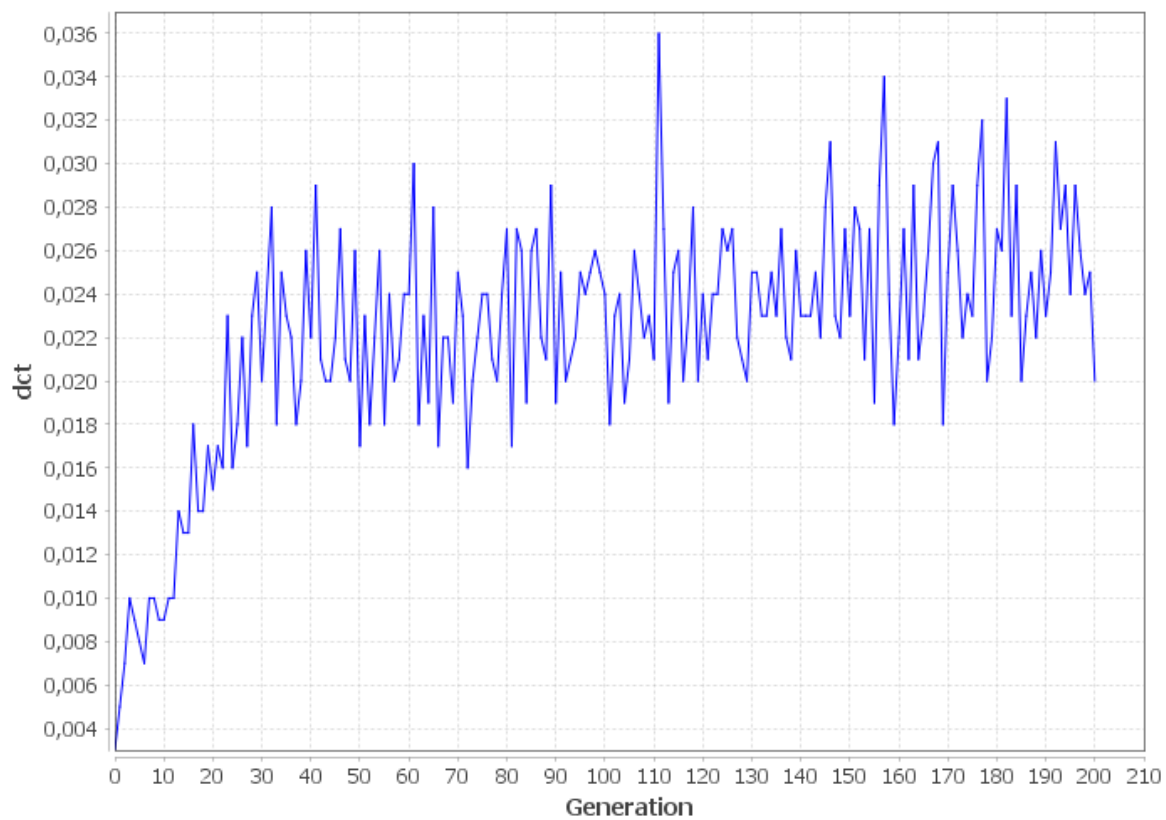
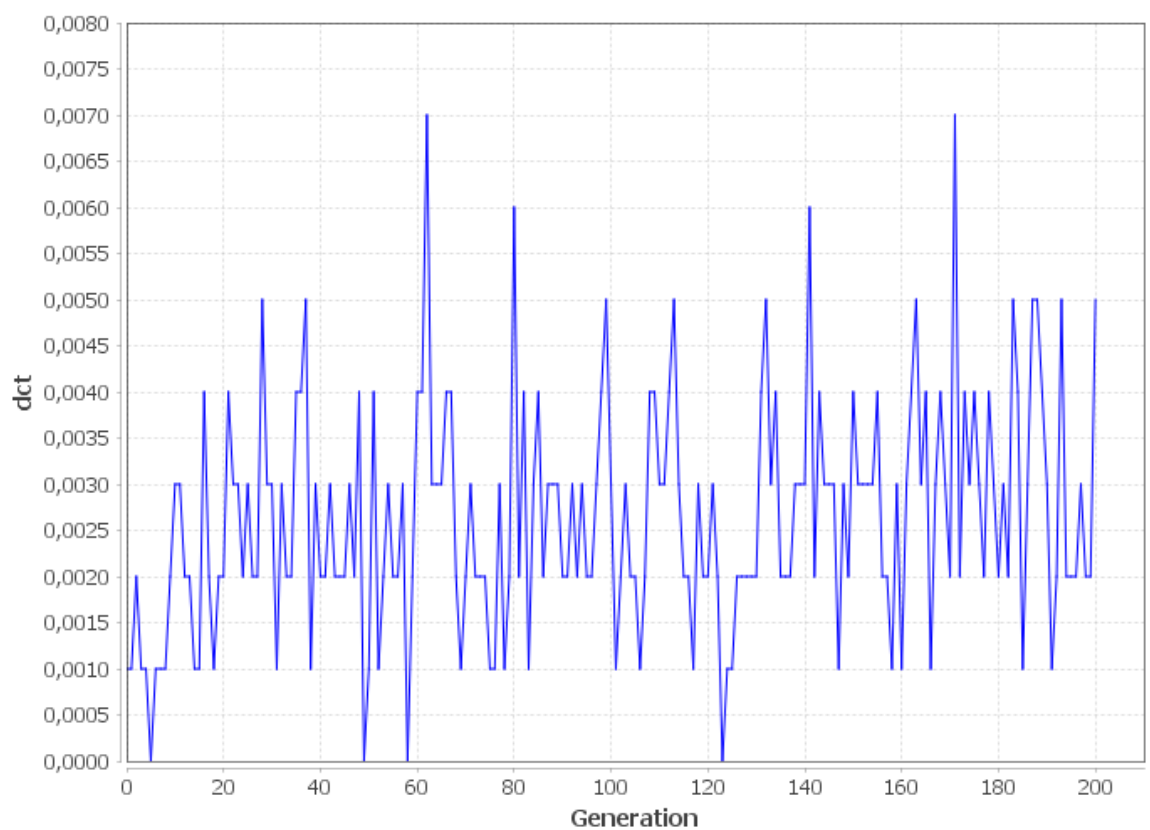


Figura 36: Evolução da avaliação da *DCT* nas execuções 3 e 4.

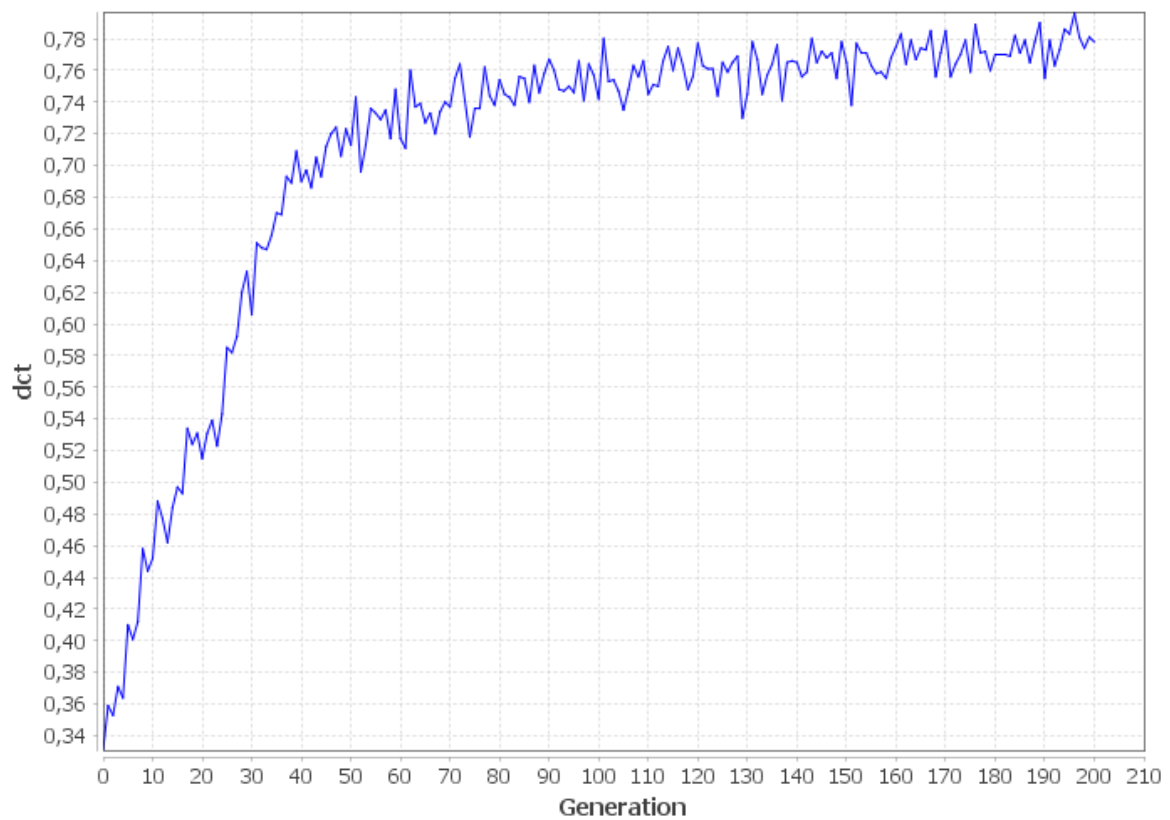
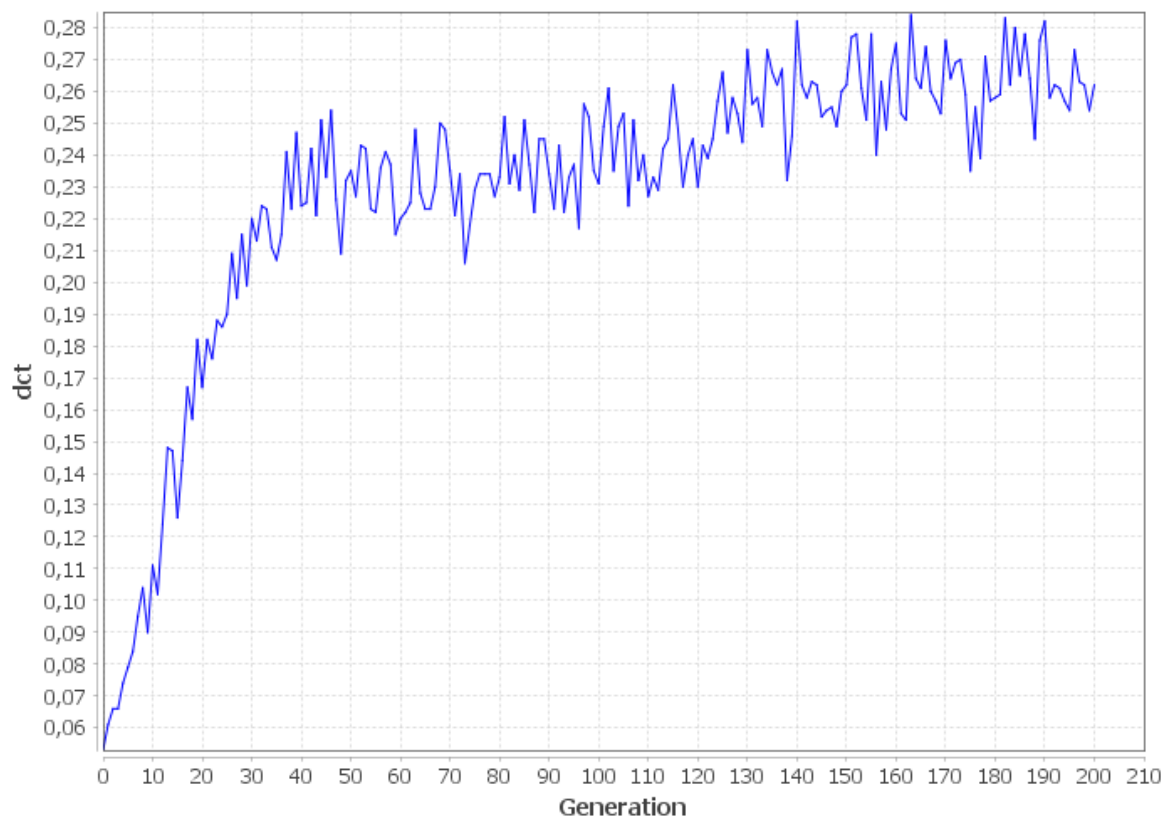


Figura 37: Evolução da avaliação da *DCT* nas execuções 5 e 6.

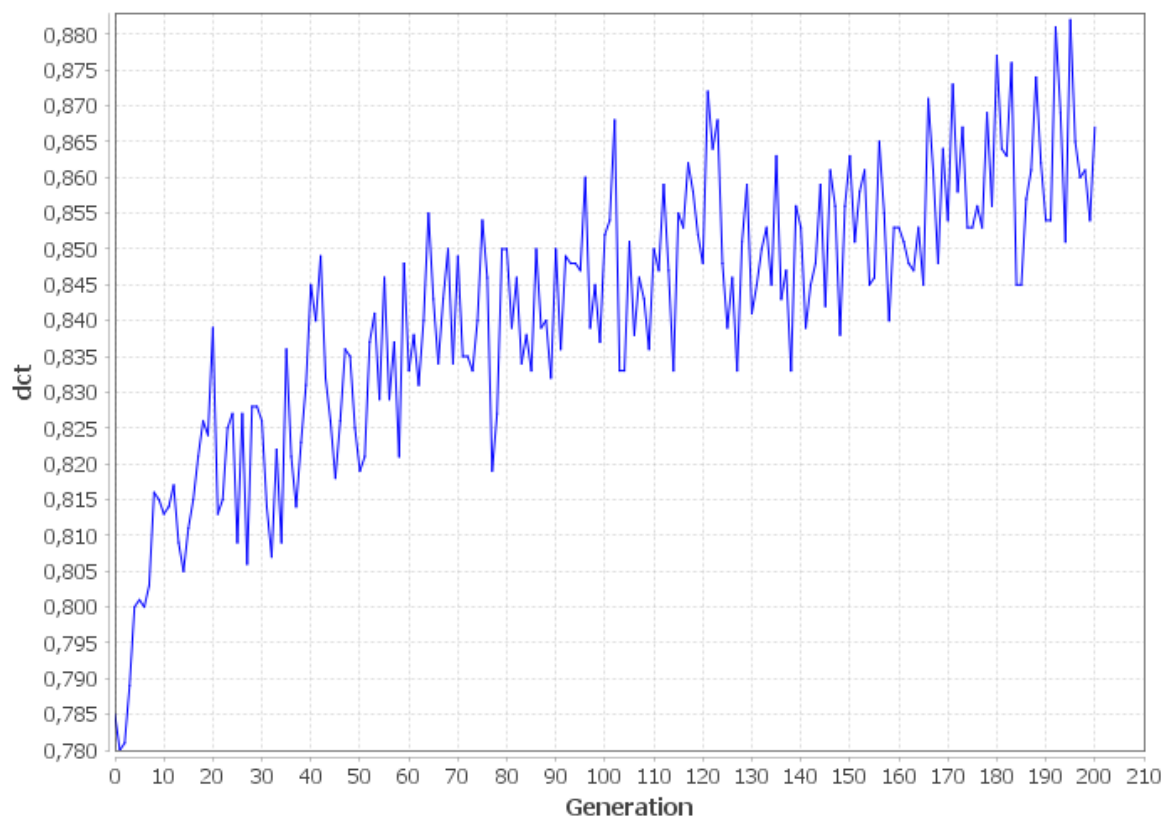


Figura 38: Evolução da avaliação da *DCT* na execução 7.

A.5 Gráficos de Evolução do Número de Passos de Tempo (η) da *DCT*

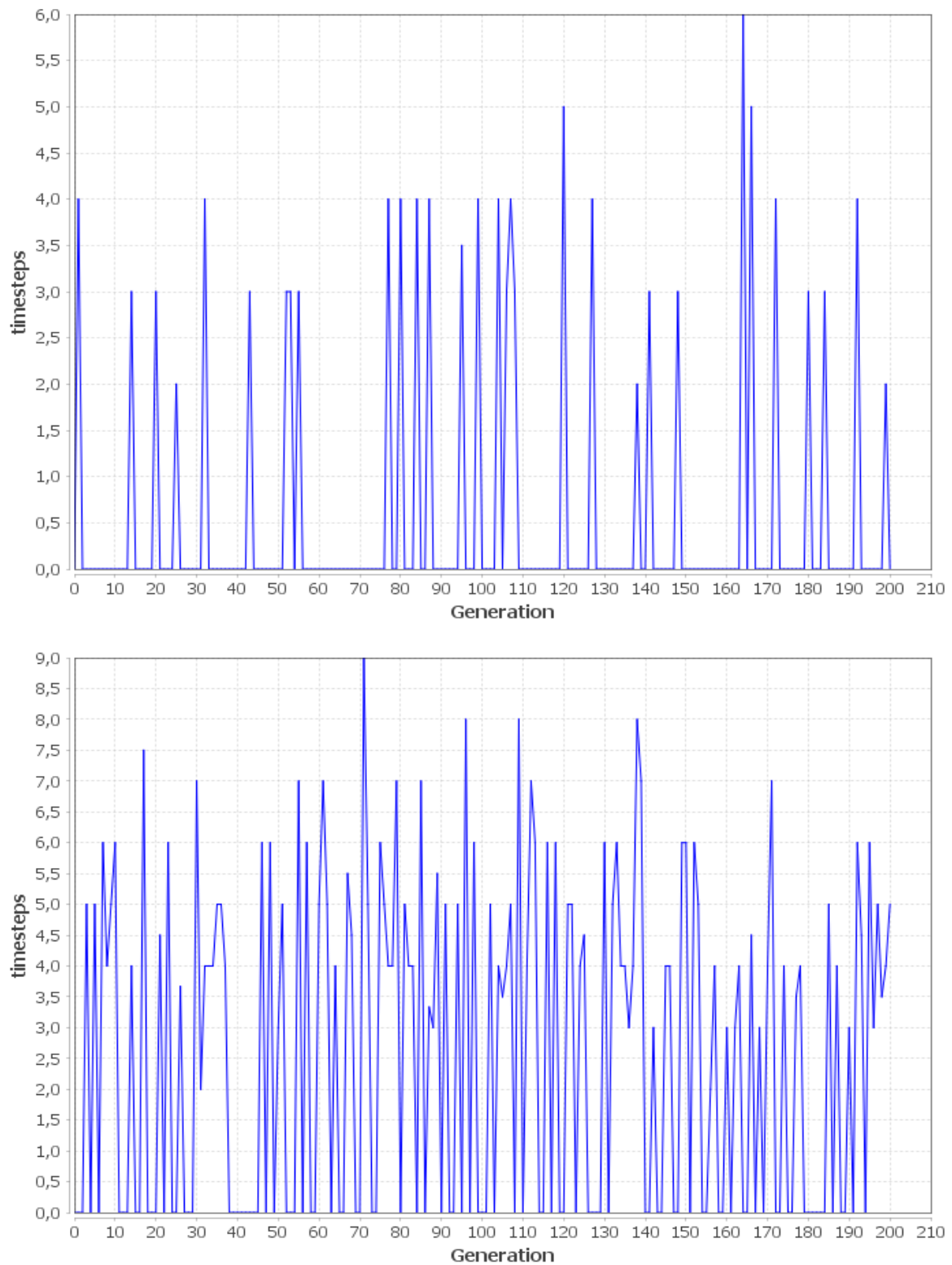


Figura 39: Evolução do número de passos de tempo da *DCT* nas execuções 1 e 2.

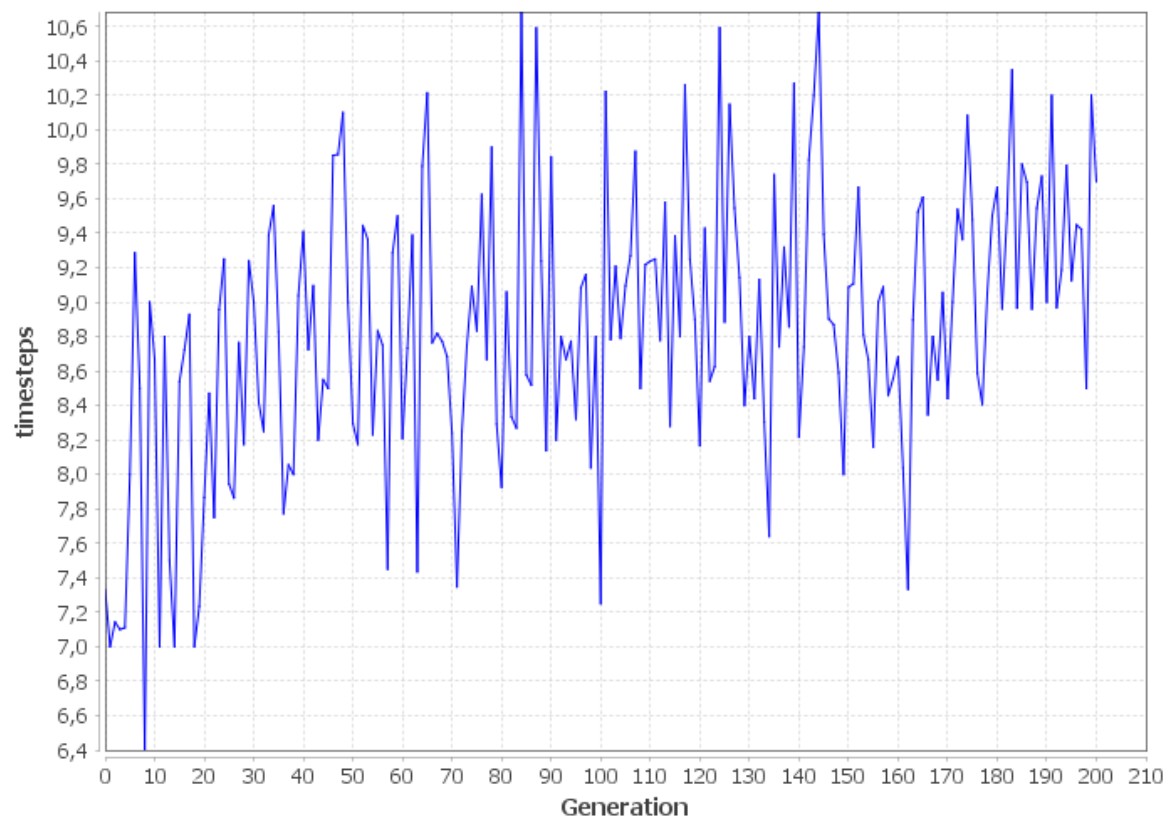
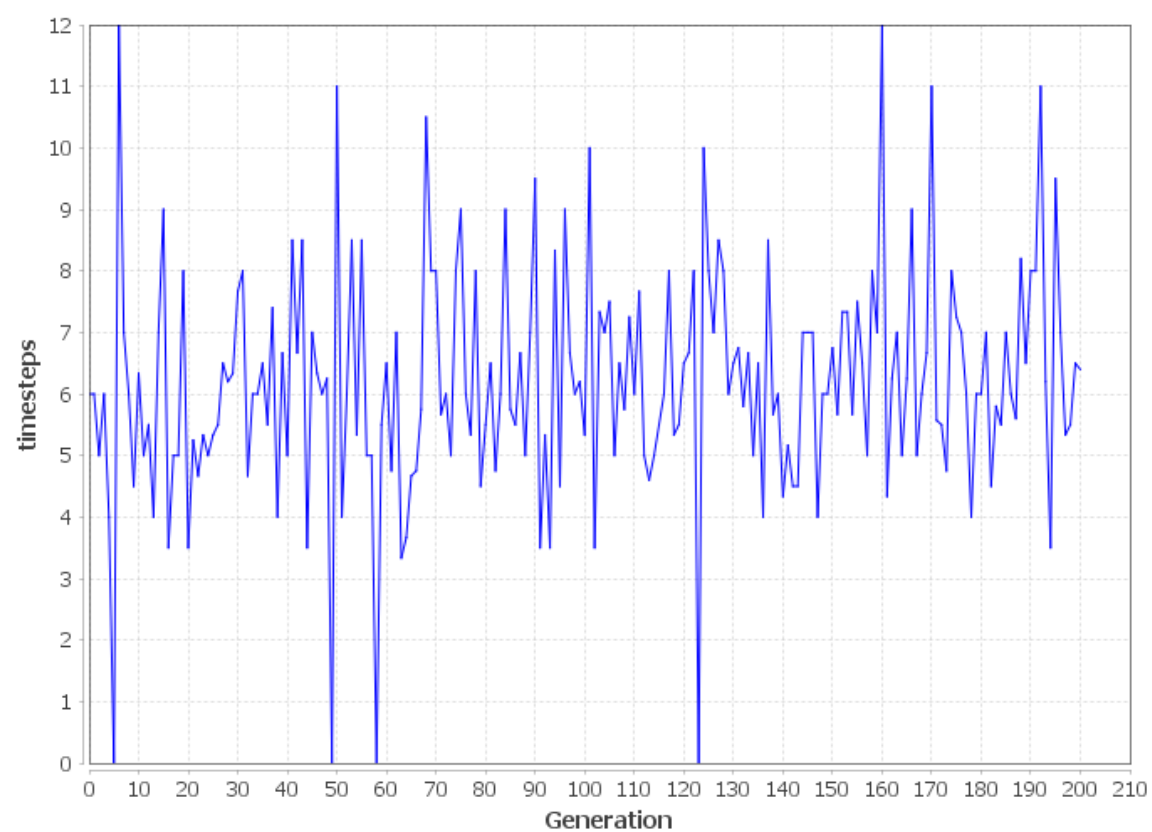


Figura 40: Evolução do número de passos de tempo da *DCT* nas execuções 3 e 4.

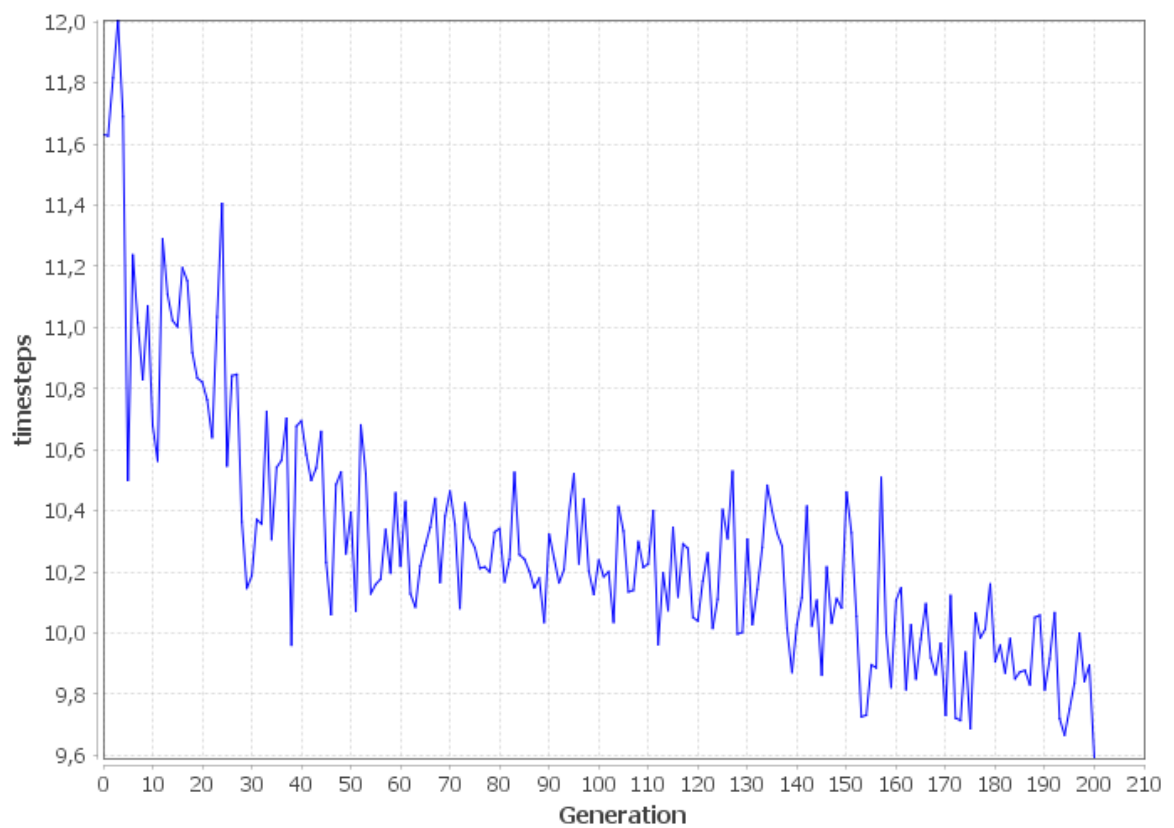
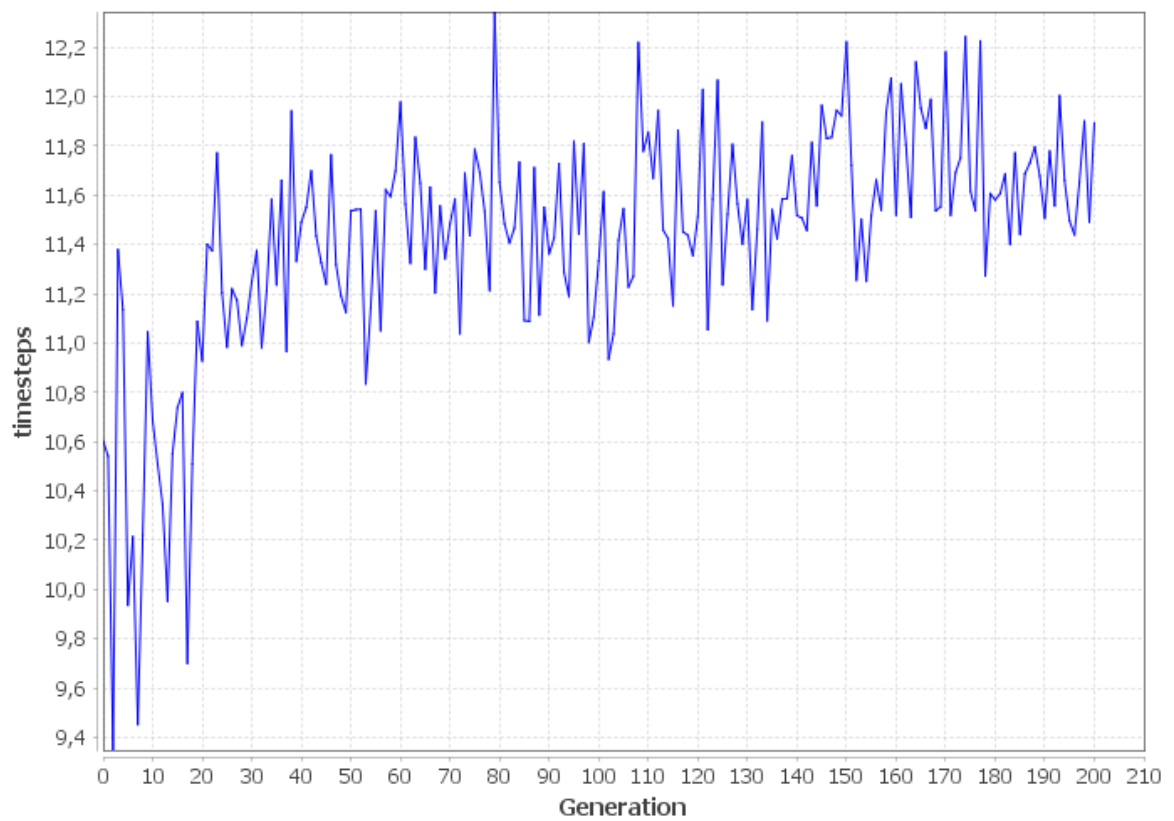


Figura 41: Evolução do número de passos de tempo da *DCT* nas execuções 5 e 6.

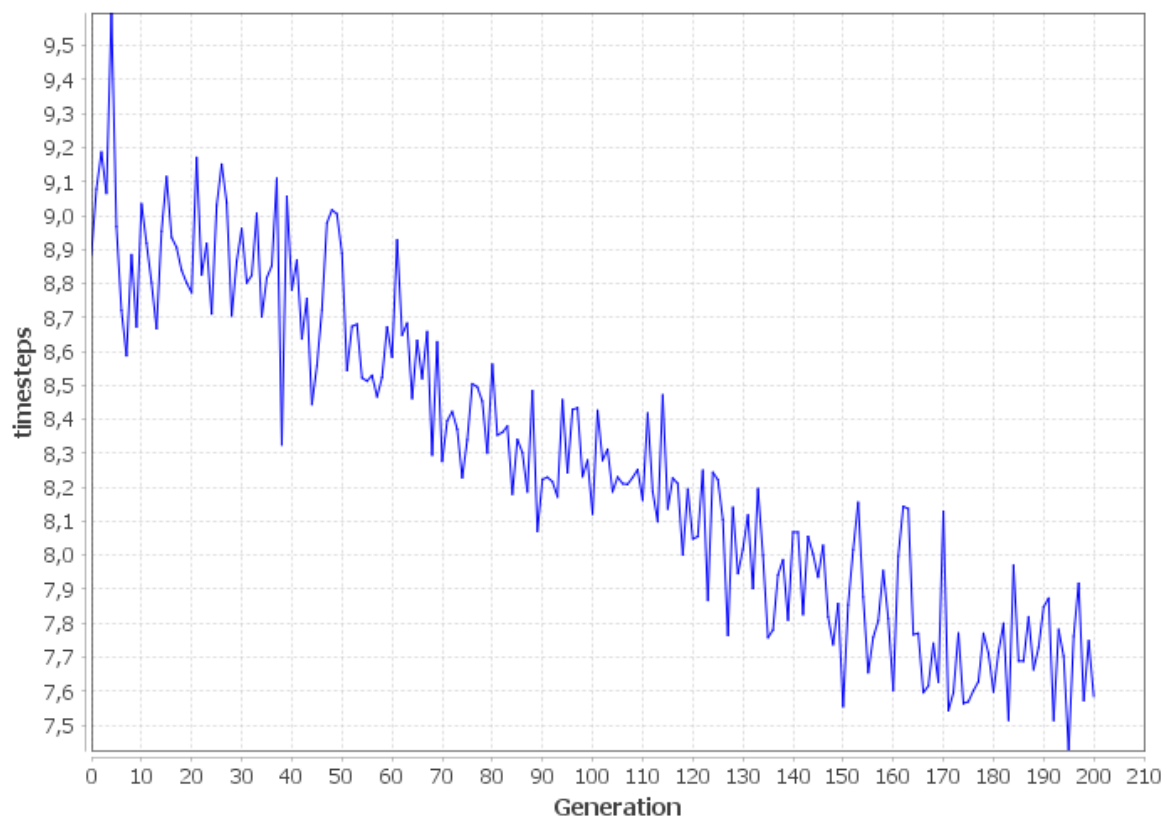


Figura 42: Evolução do número de passos de tempo da *DCT* na execução 7.

Apêndice B - Experimento da Seção 4.1 (Nearly Bal.)

B.1 Gráficos de Evolução do Caminho Mínimo Médio (L)

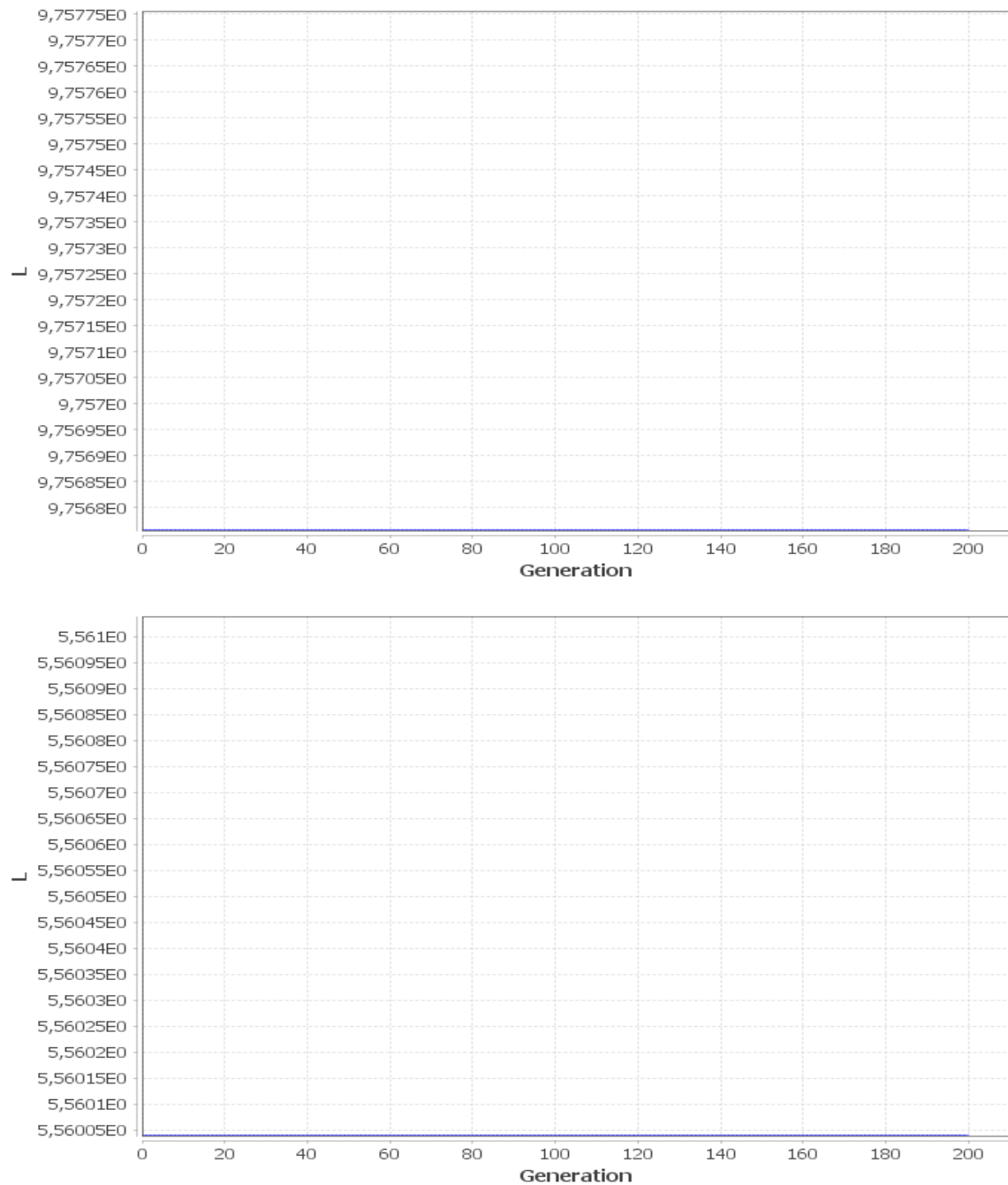


Figura 43: Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 1 e 2.

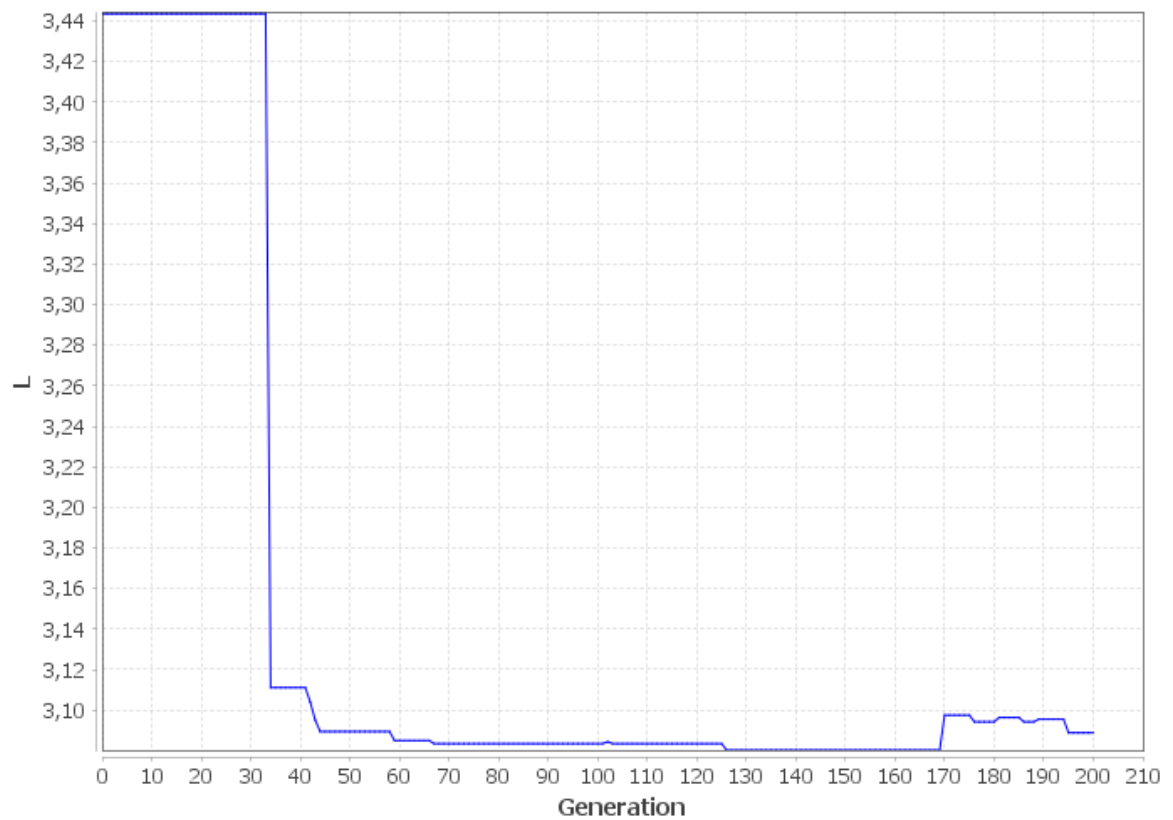
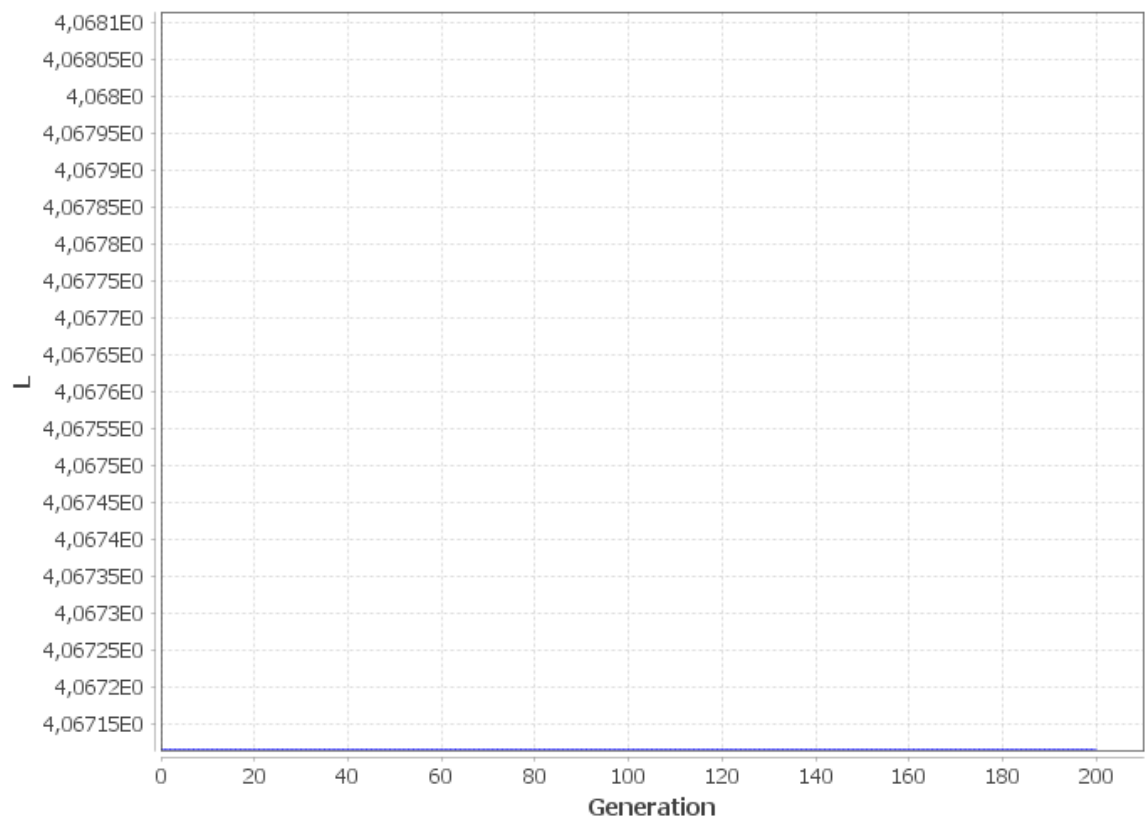


Figura 44: Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 3 e 4.

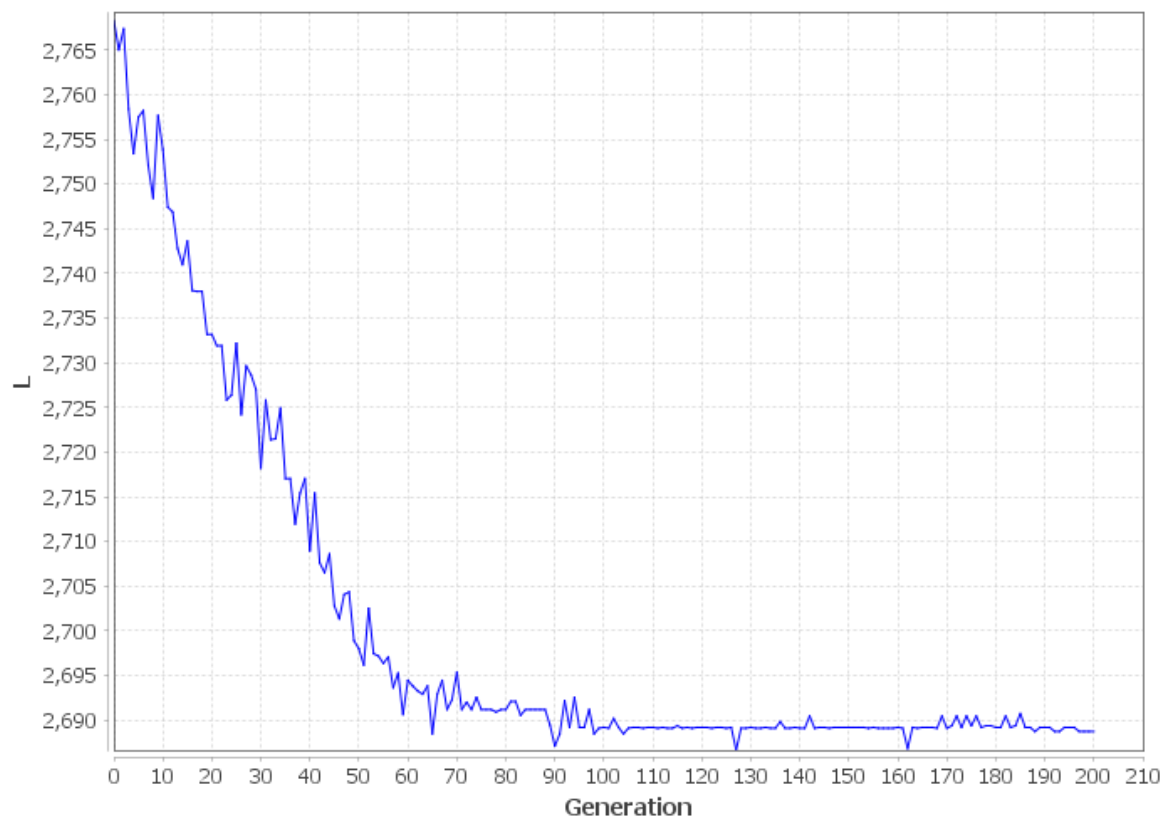


Figura 45: Evolução do caminho mínimo médio nas execuções 5 e 6.

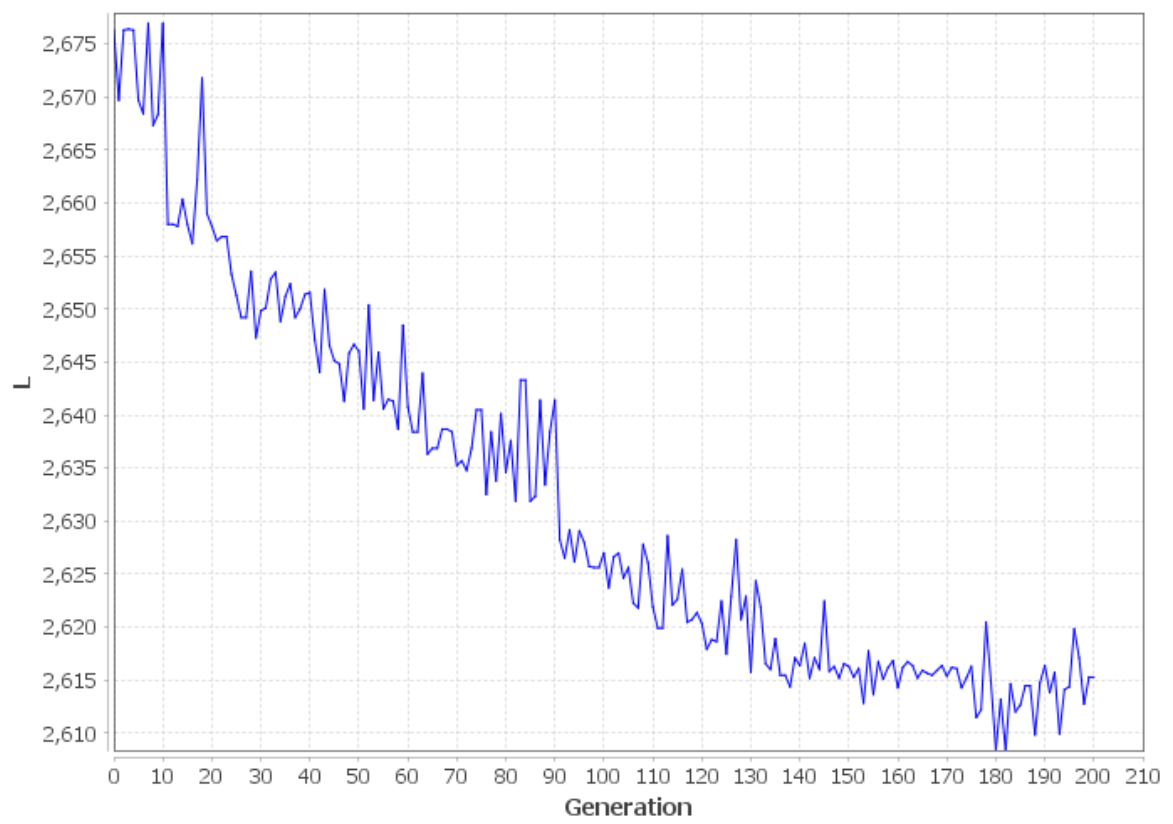


Figura 46: Evolução do caminho mínimo médio na execução 7.

B.2 Gráficos de Evolução do Coeficiente de Agrupamento (C)

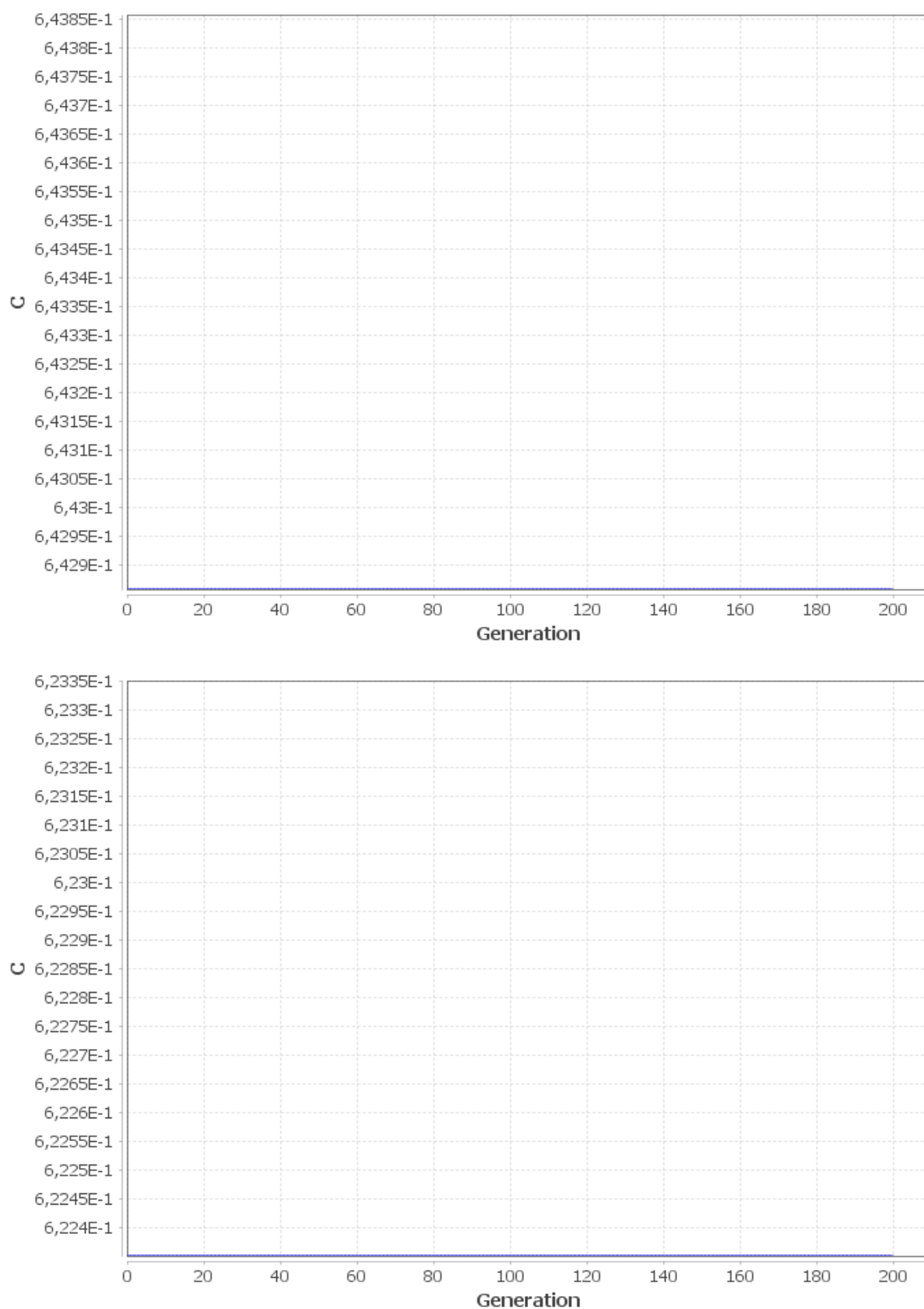


Figura 47: Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 1 e 2.

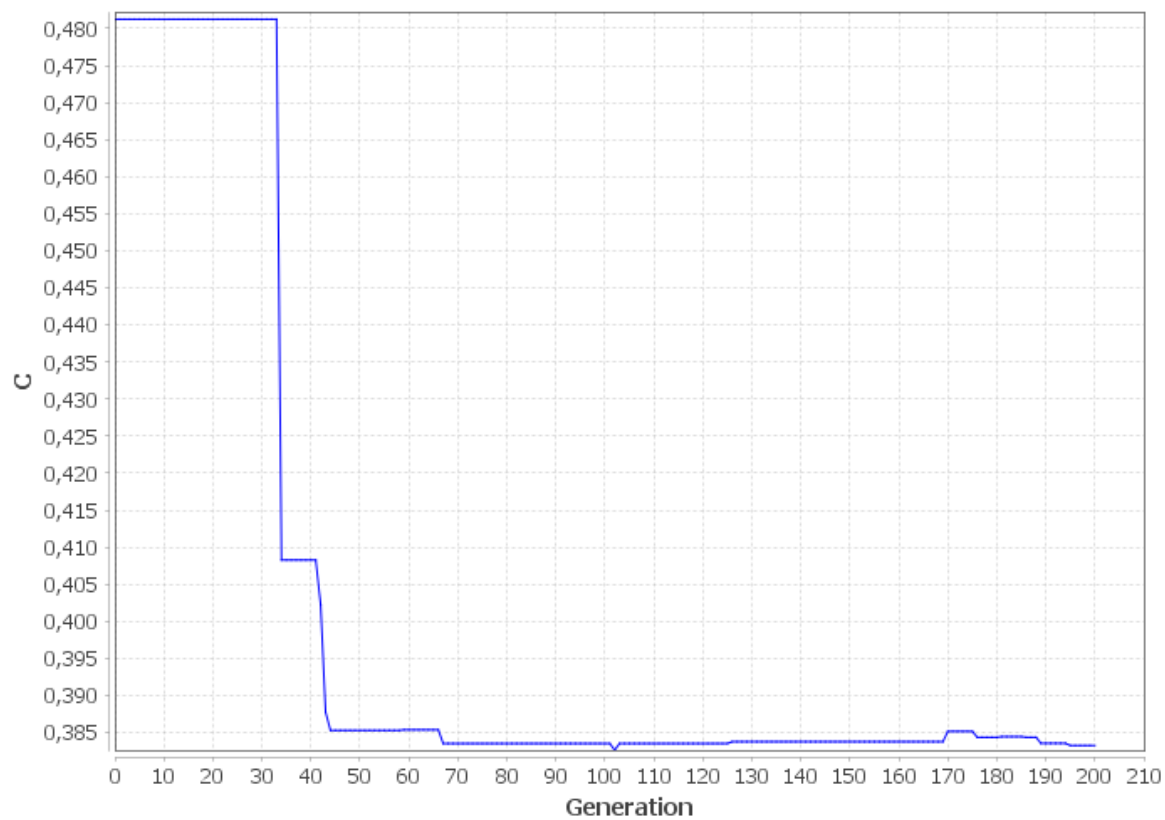
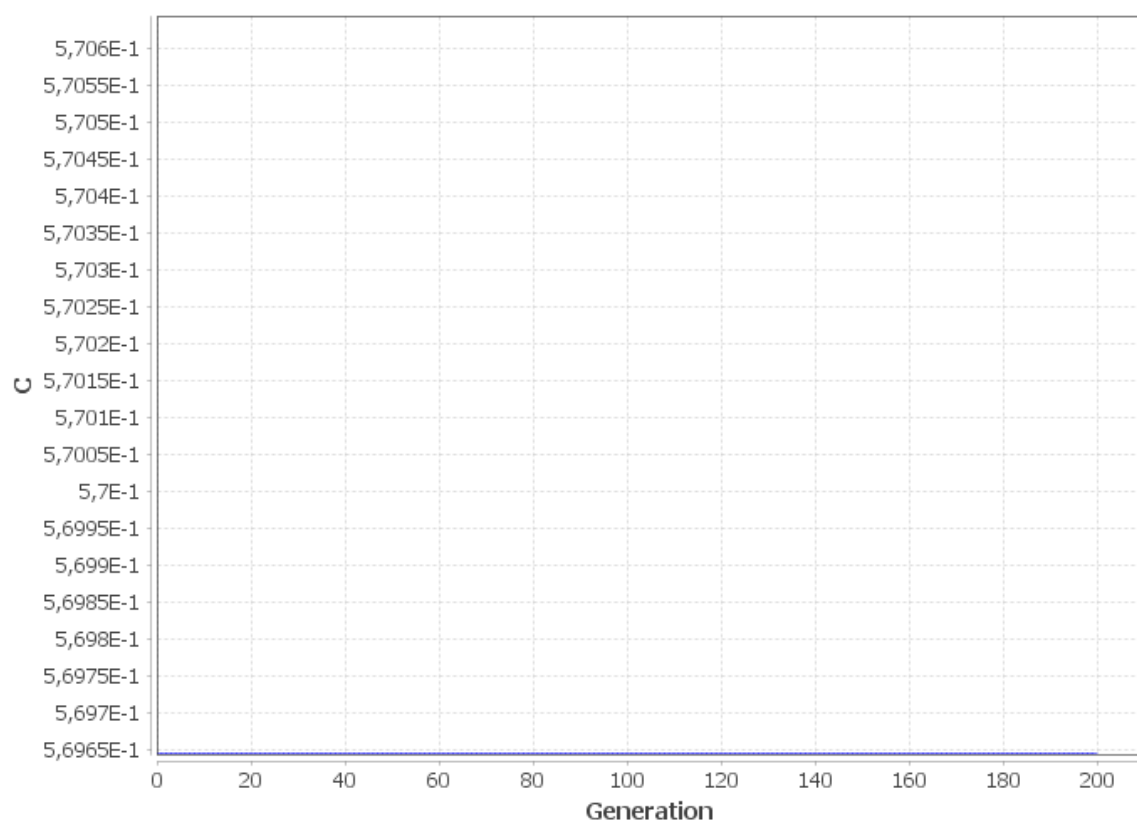


Figura 48: Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 3 e 4.

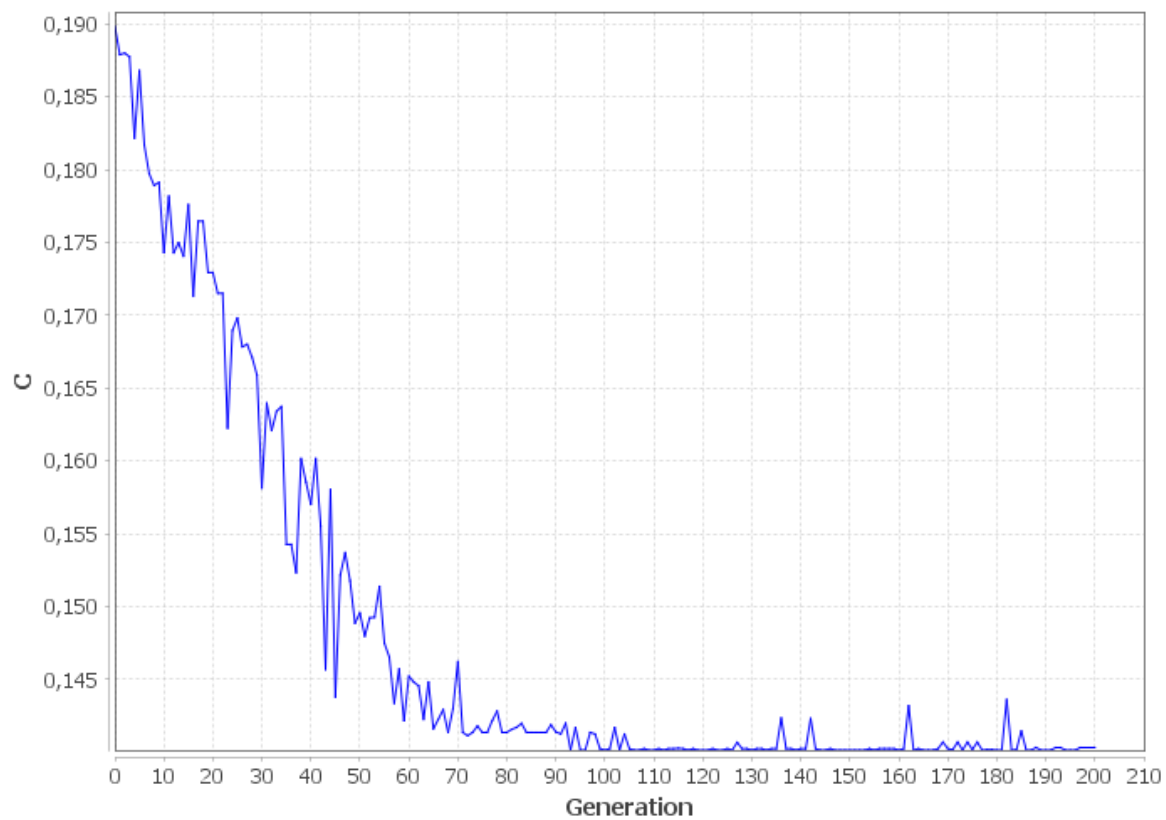
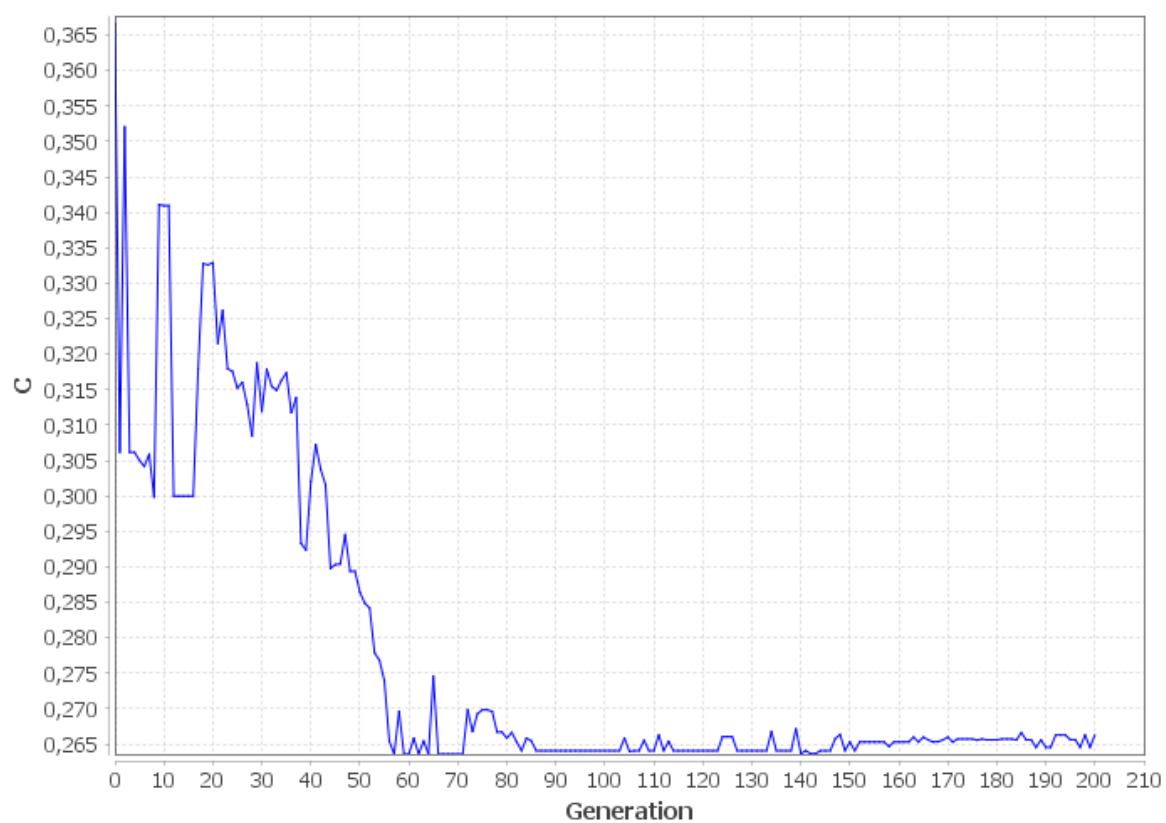


Figura 49: Evolução do coeficiente de agrupamento nas execuções 5 e 6.

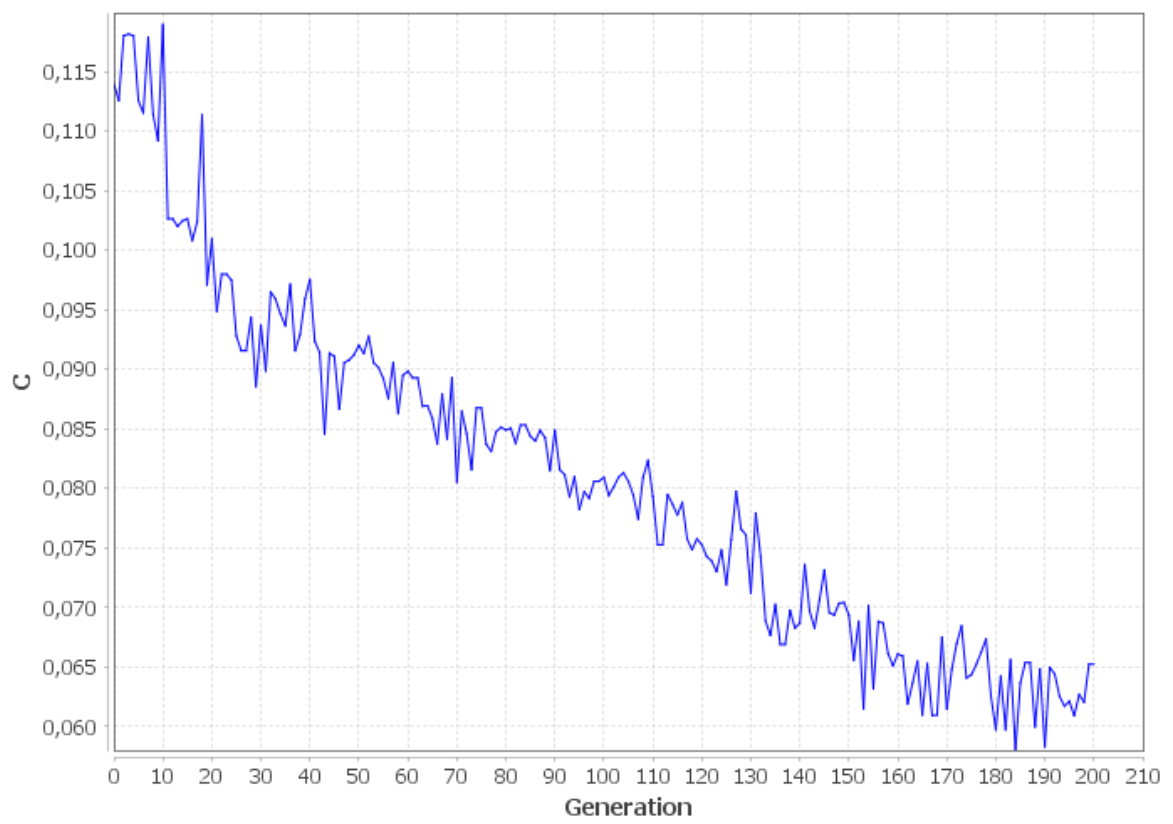


Figura 50: Evolução do coeficiente de agrupamento na execução 7.

B.3 Gráficos de Evolução do Coeficiente Ômega (ω)

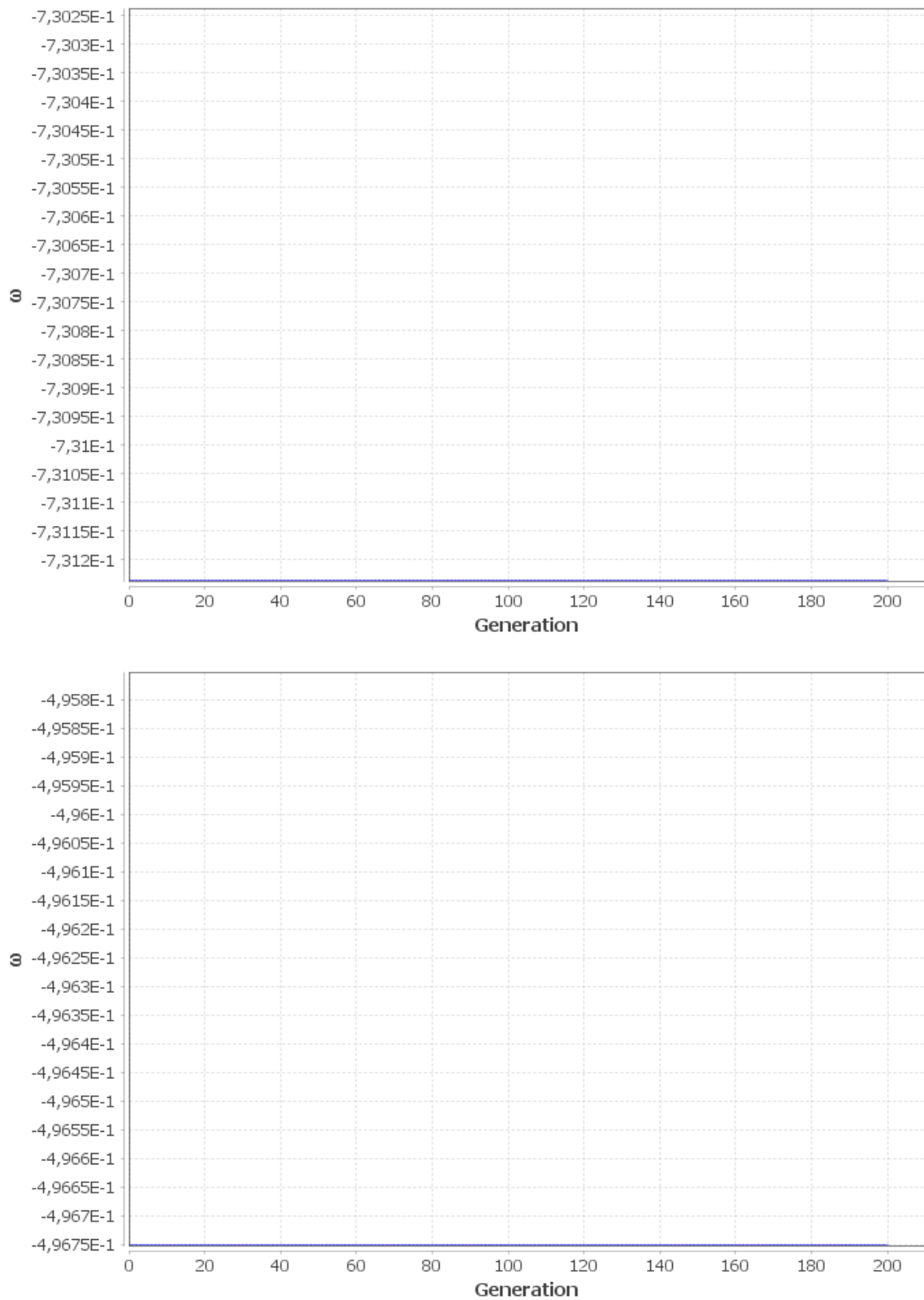


Figura 51: Evolução do coeficiente ômega nas execuções 1 e 2.

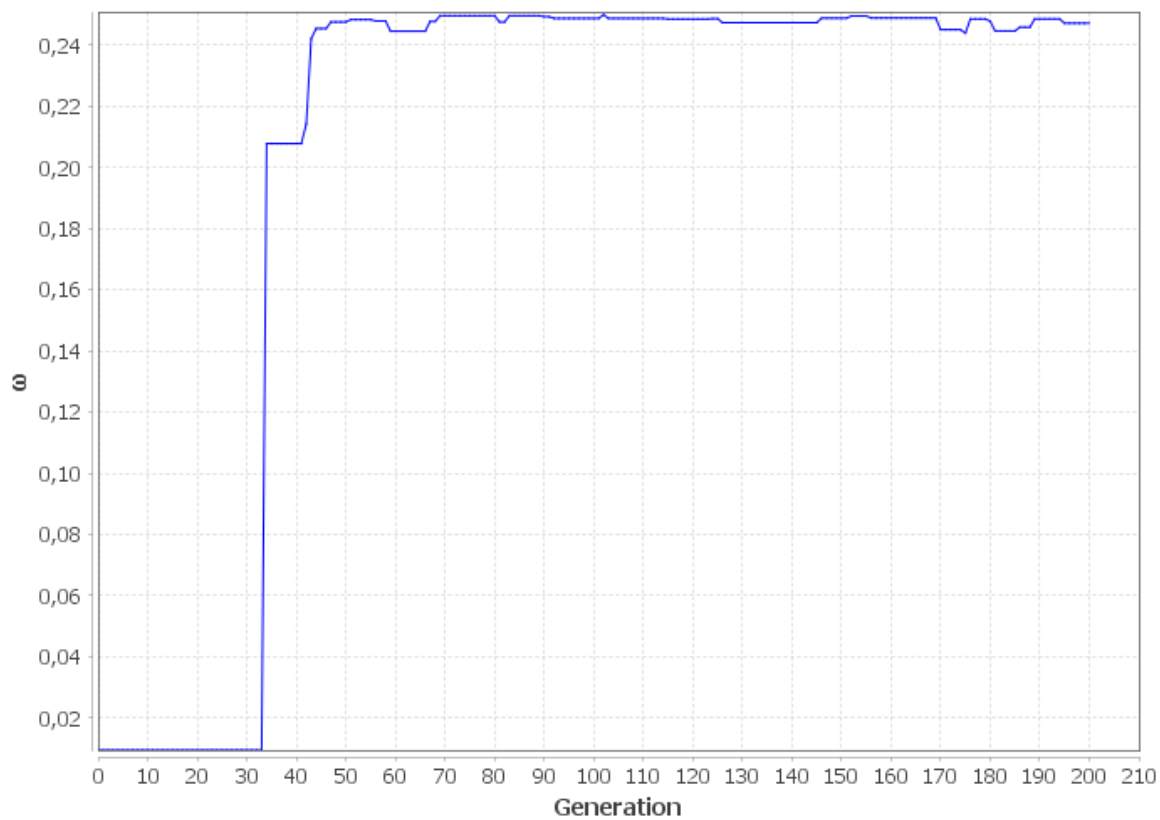
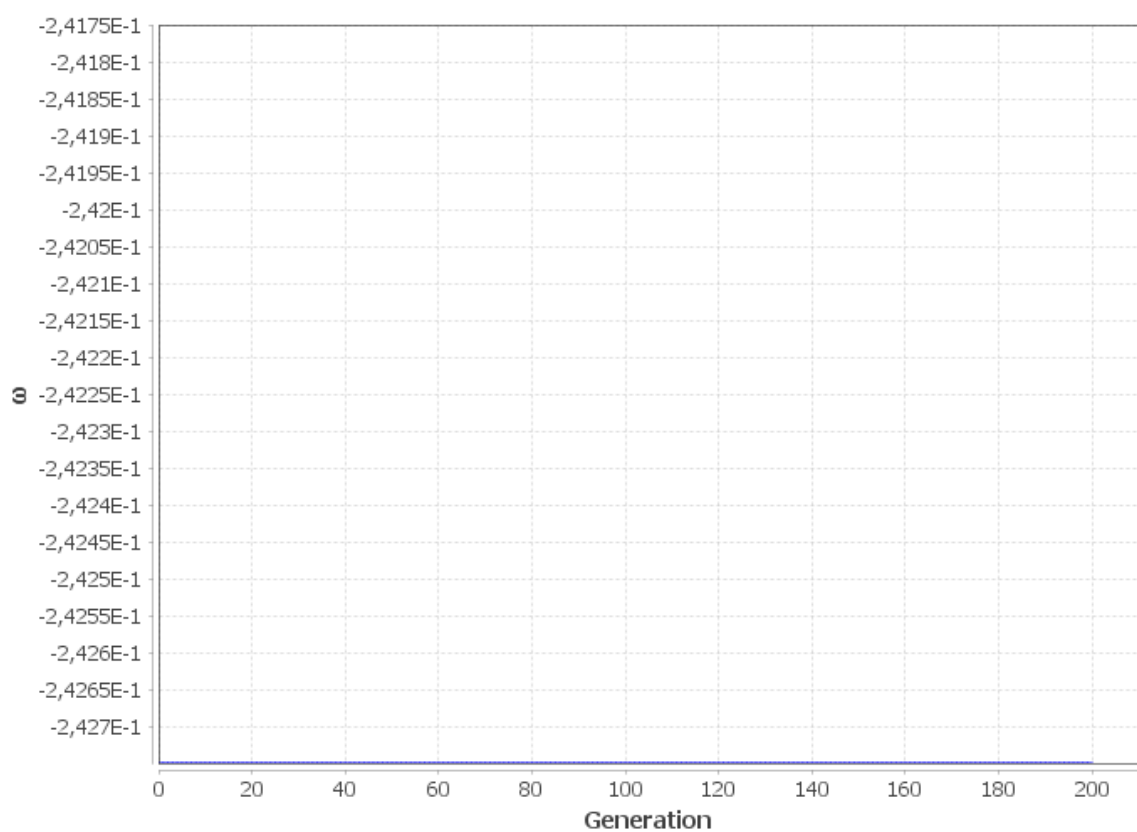


Figura 52: Evolução do coeficiente ω nas execuções 3 e 4.

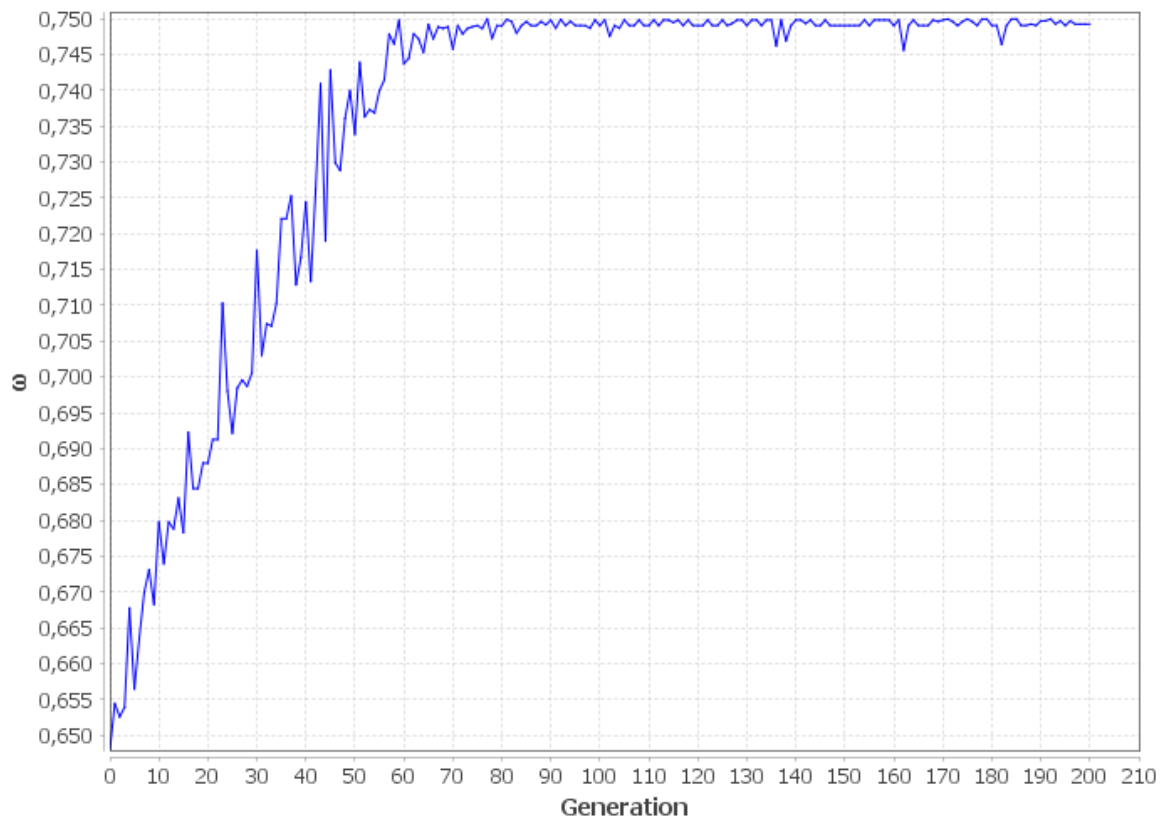
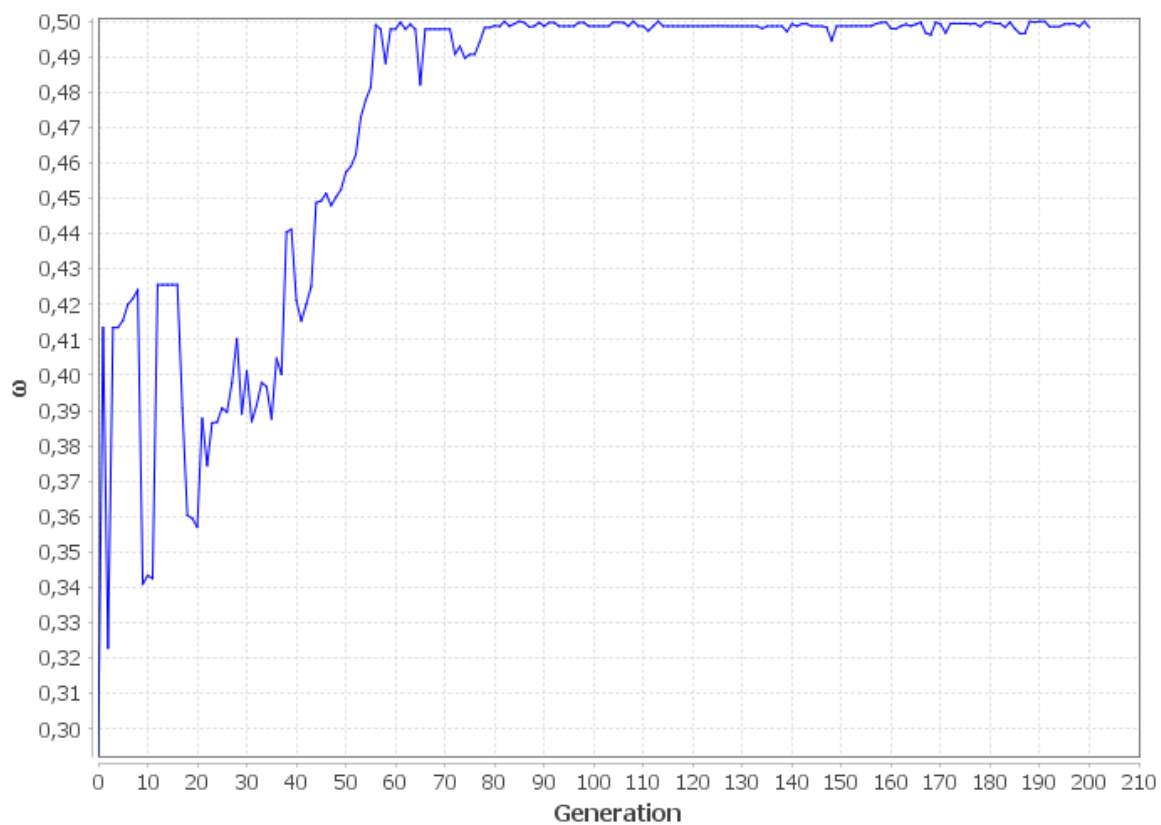


Figura 53: Evolução do coeficiente ω nas execuções 5 e 6.

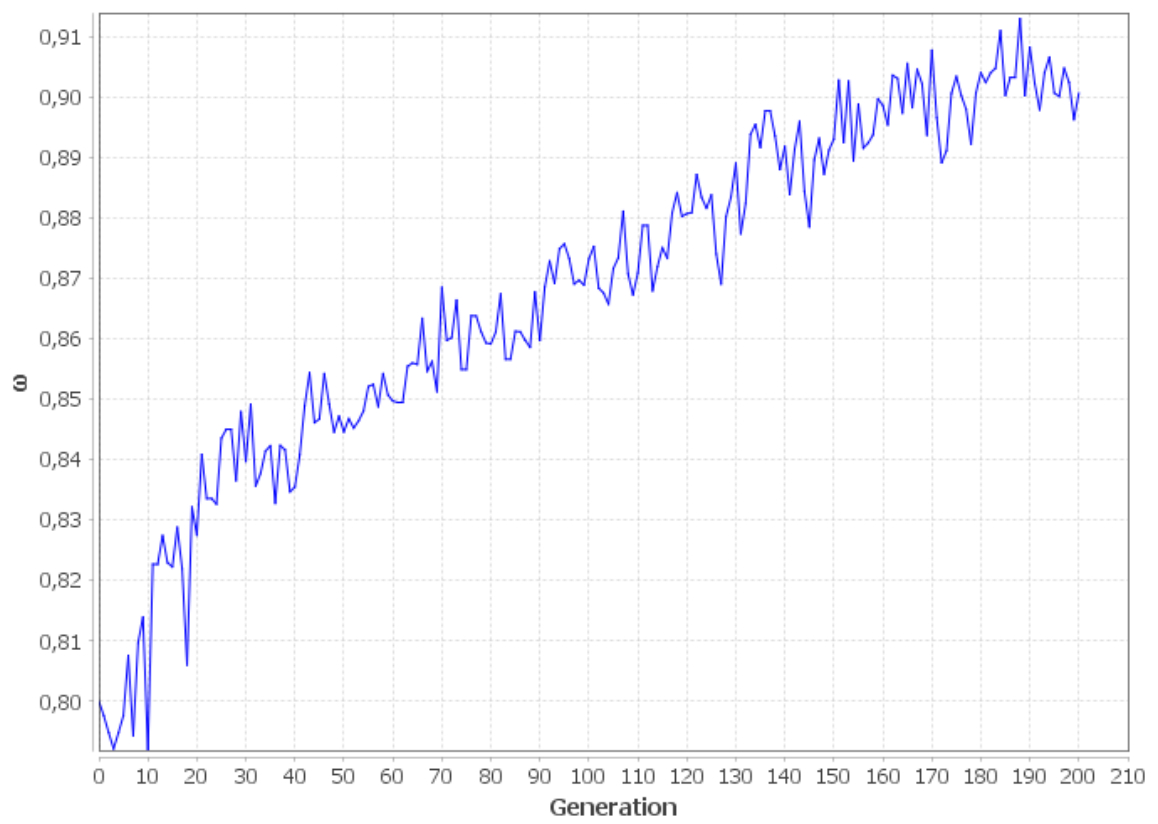


Figura 54: Evolução do coeficiente ω na execução 7.

B.4 Gráficos de Evolução da Avaliação da *DCT*

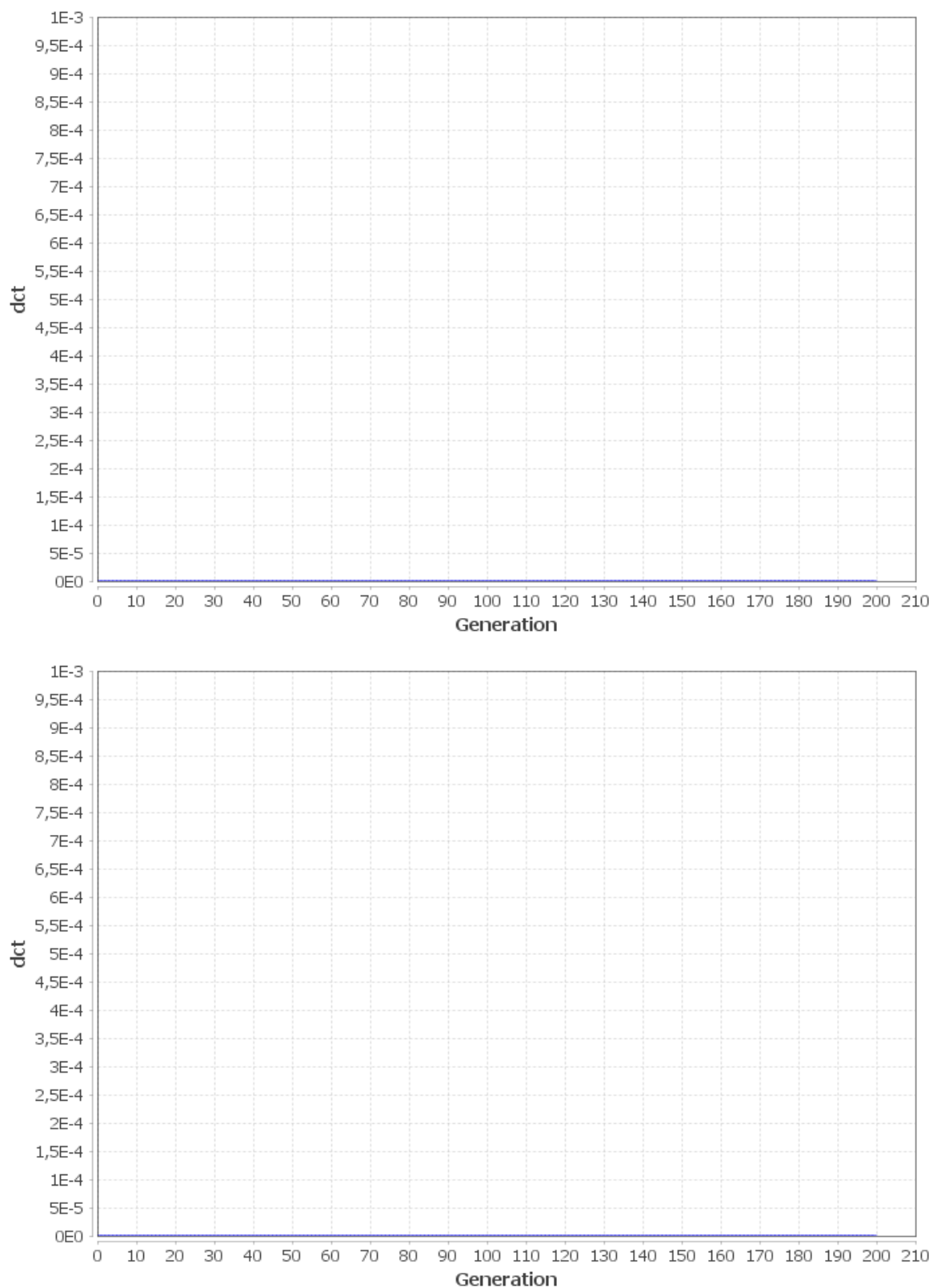


Figura 55: Evolução da avaliação da *DCT* nas execuções 1 e 2.

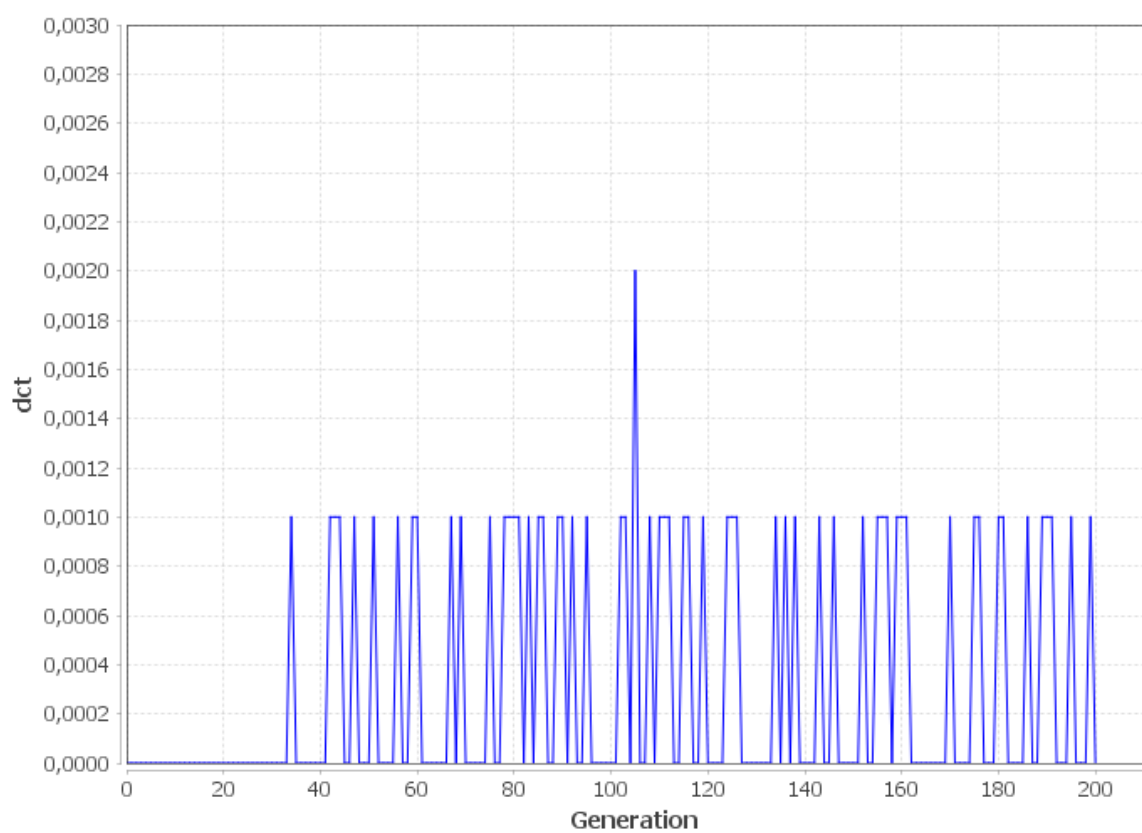
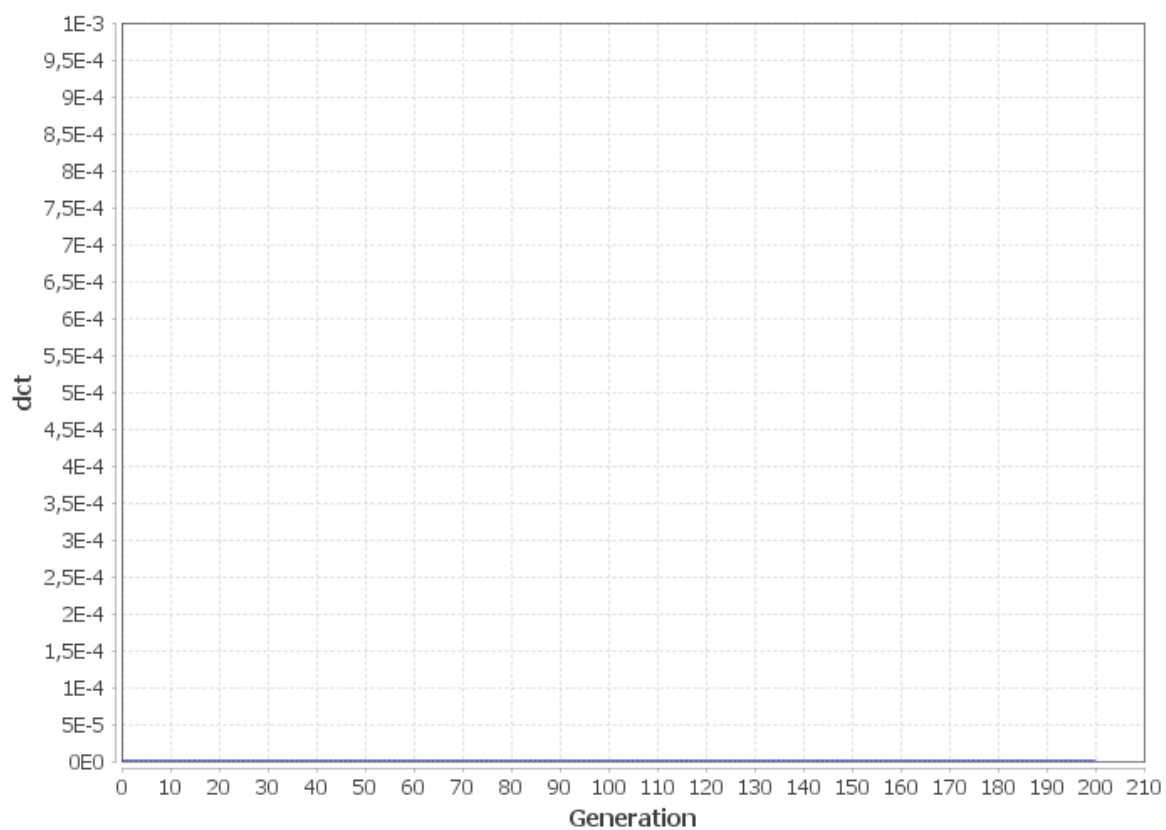


Figura 56: Evolução da avaliação da *DCT* nas execuções 3 e 4.

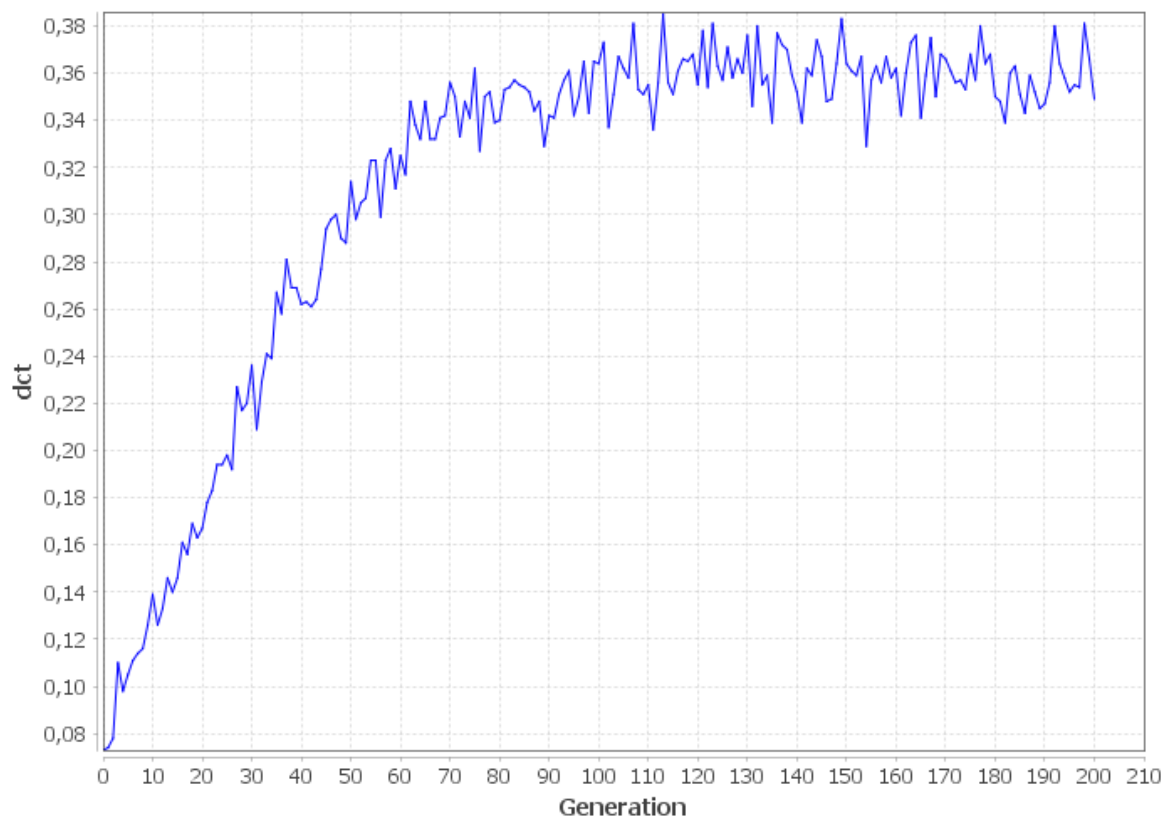
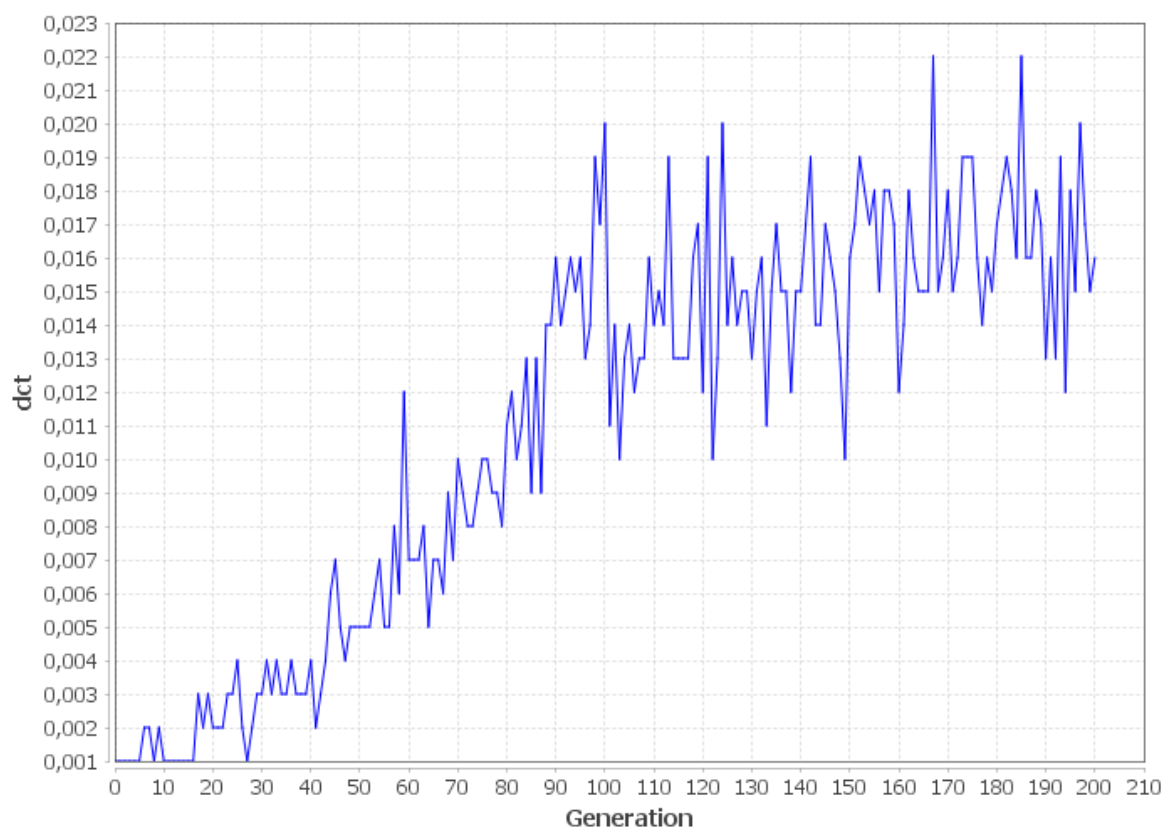


Figura 57: Evolução da avaliação da *DCT* nas execuções 5 e 6.

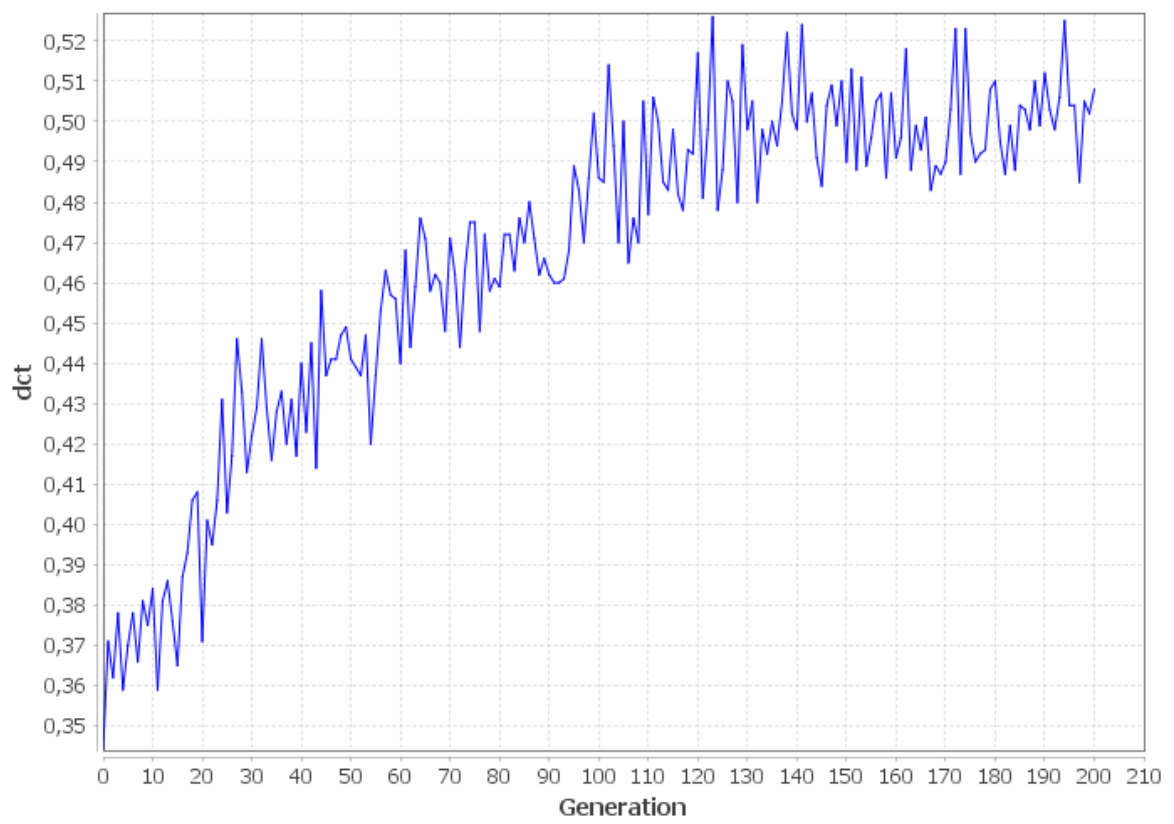


Figura 58: Evolução da avaliação da *DCT* na execução 7.

B.5 Gráficos de Evolução do Número de Passos de Tempo (η) da *DCT*

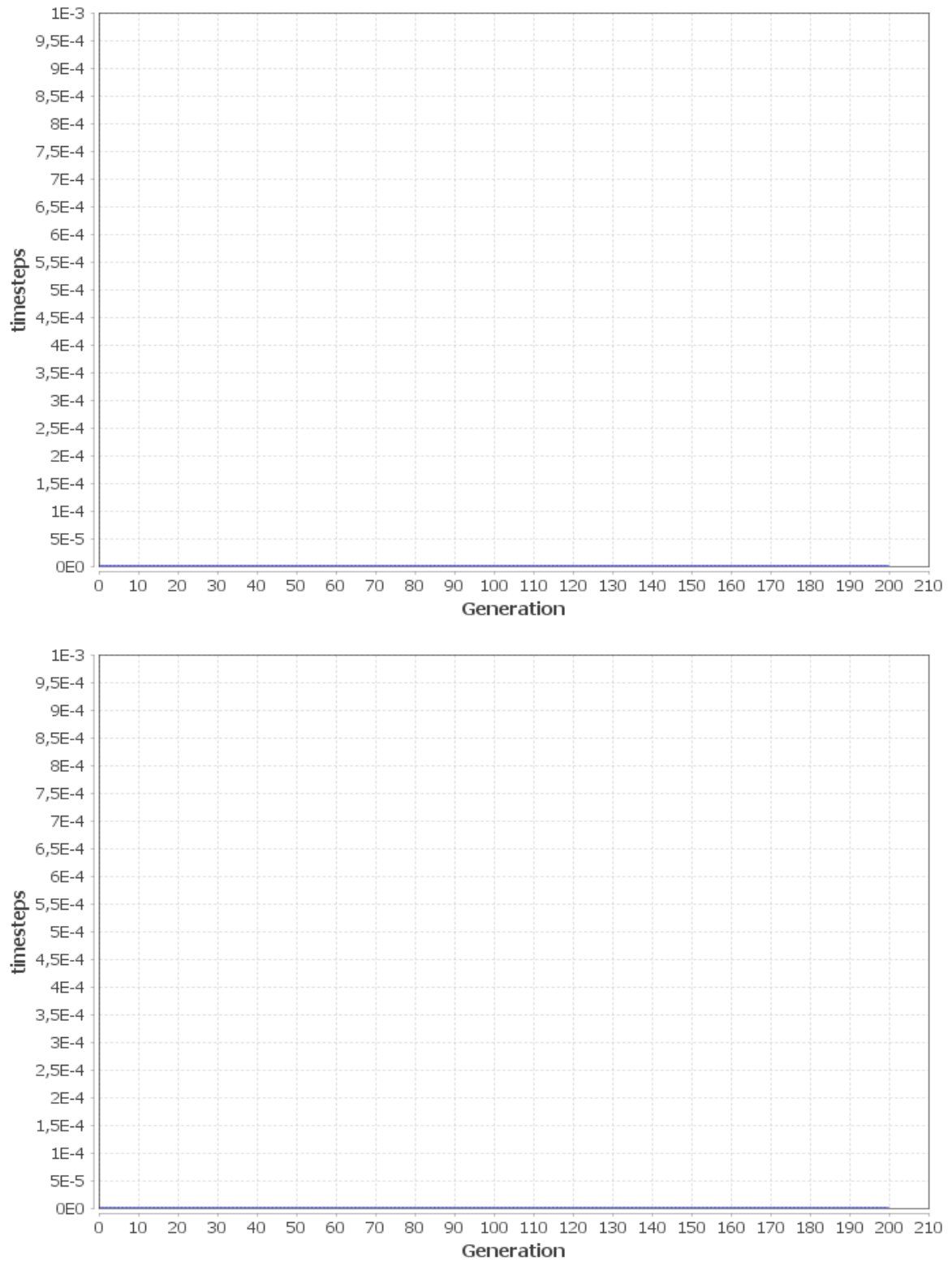


Figura 59: Evolução do número de passos de tempo da *DCT* nas execuções 1 e 2.

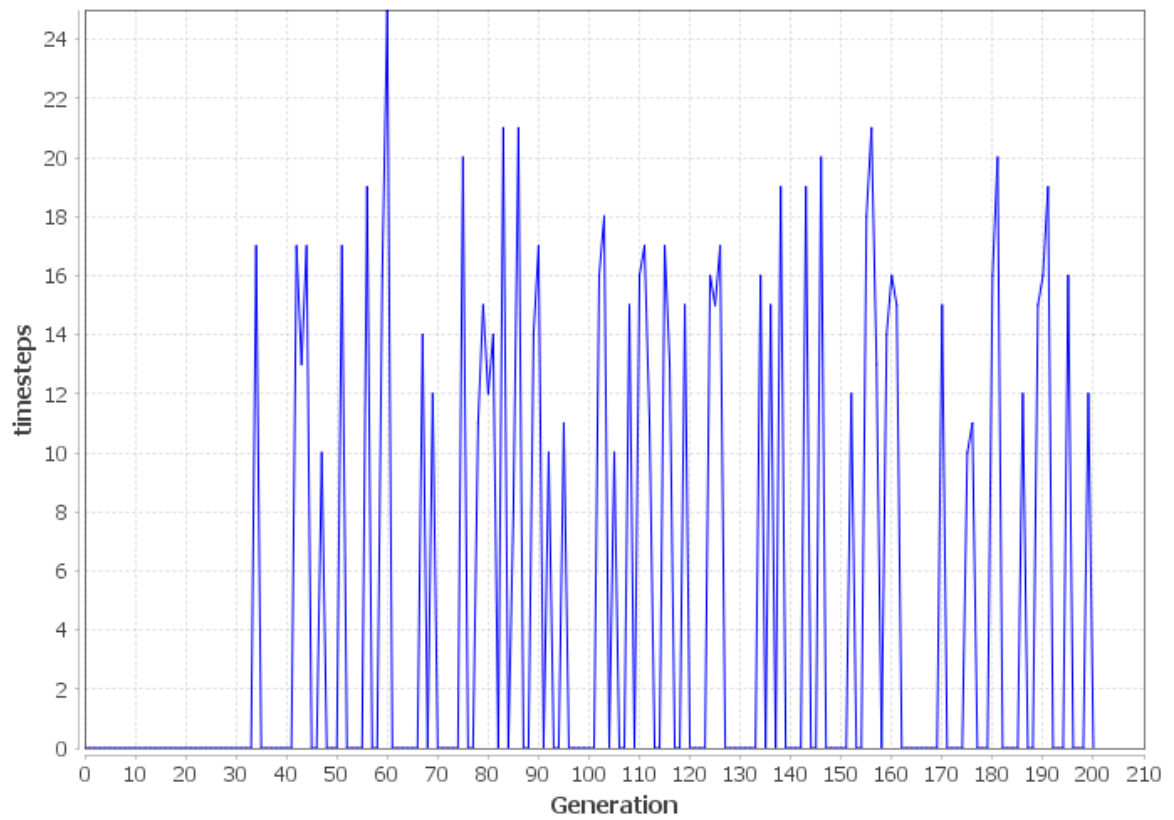
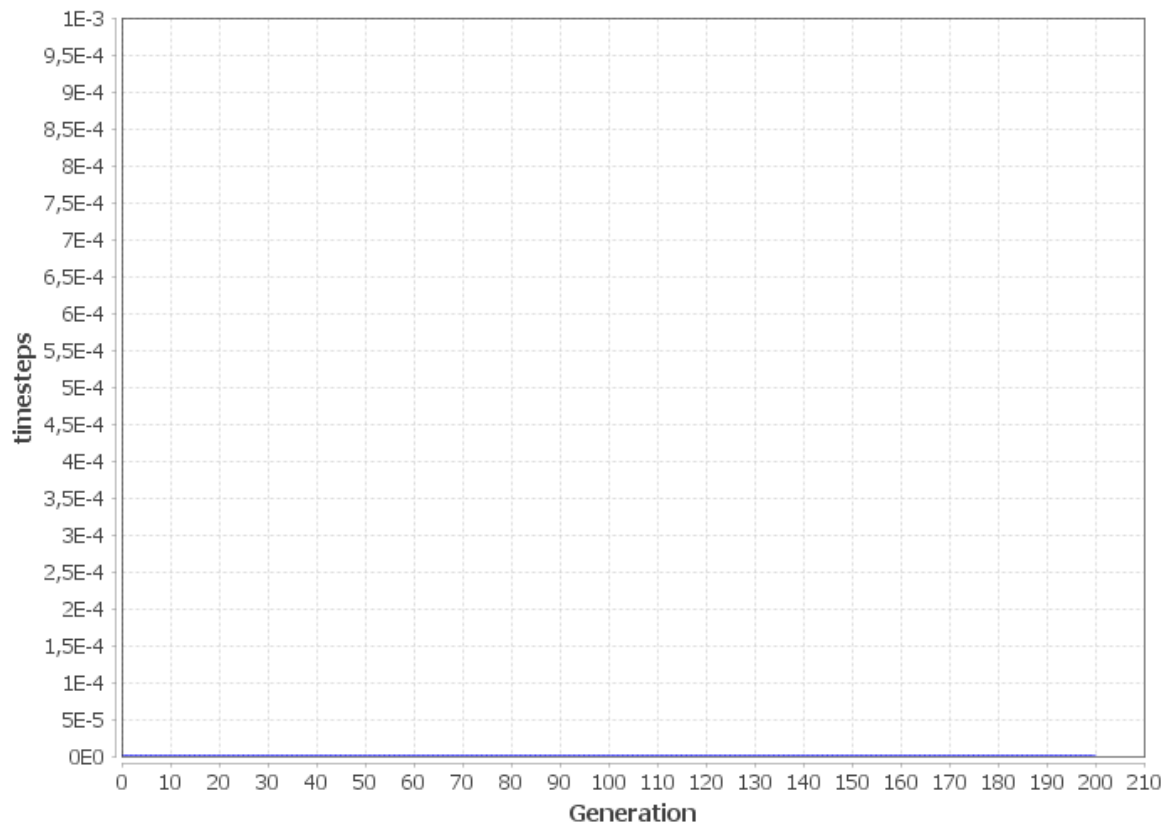


Figura 60: Evolução do número de passos de tempo da *DCT* nas execuções 3 e 4.

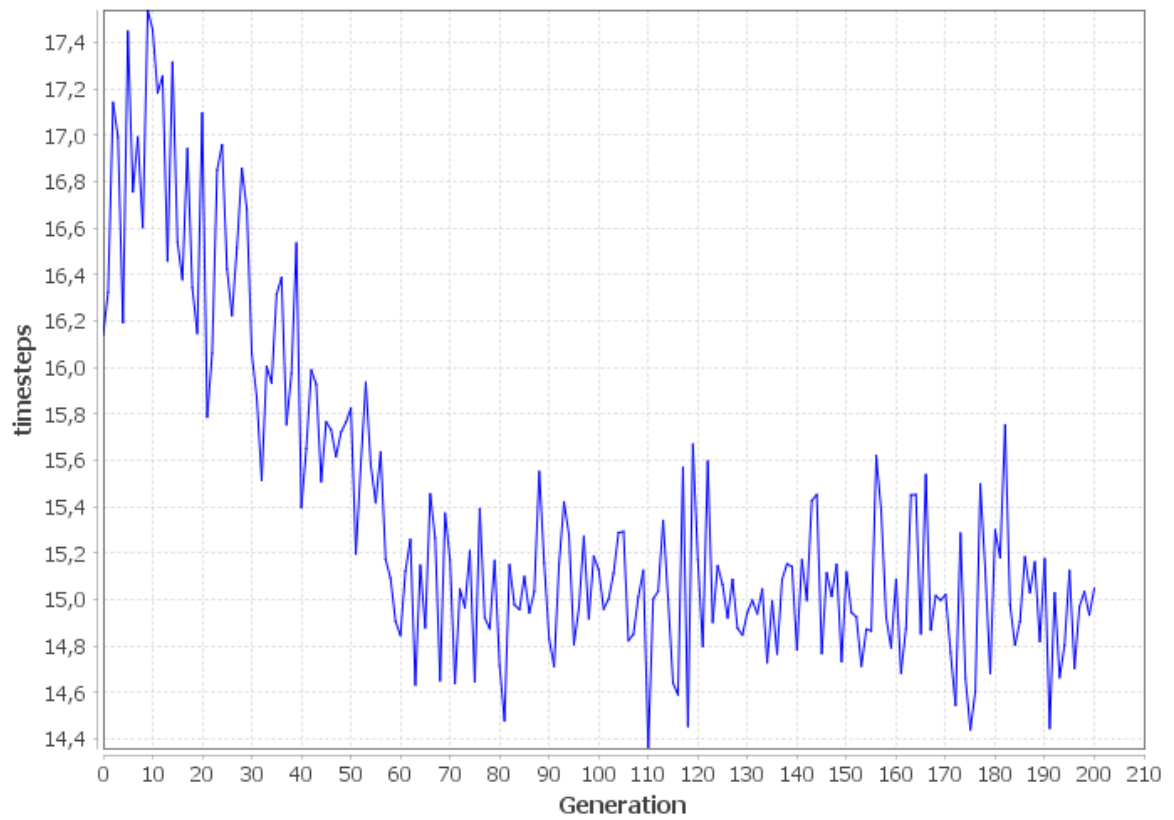
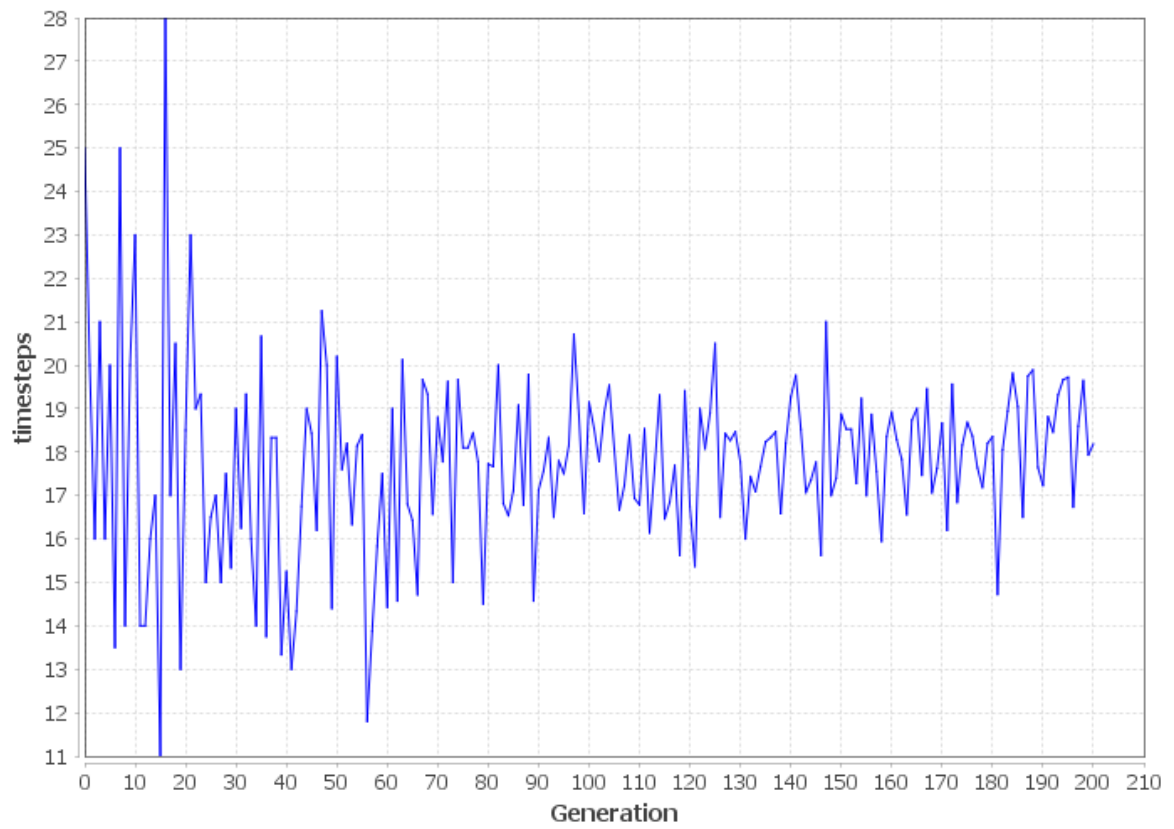


Figura 61: Evolução do número de passos de tempo da *DCT* nas execuções 5 e 6.

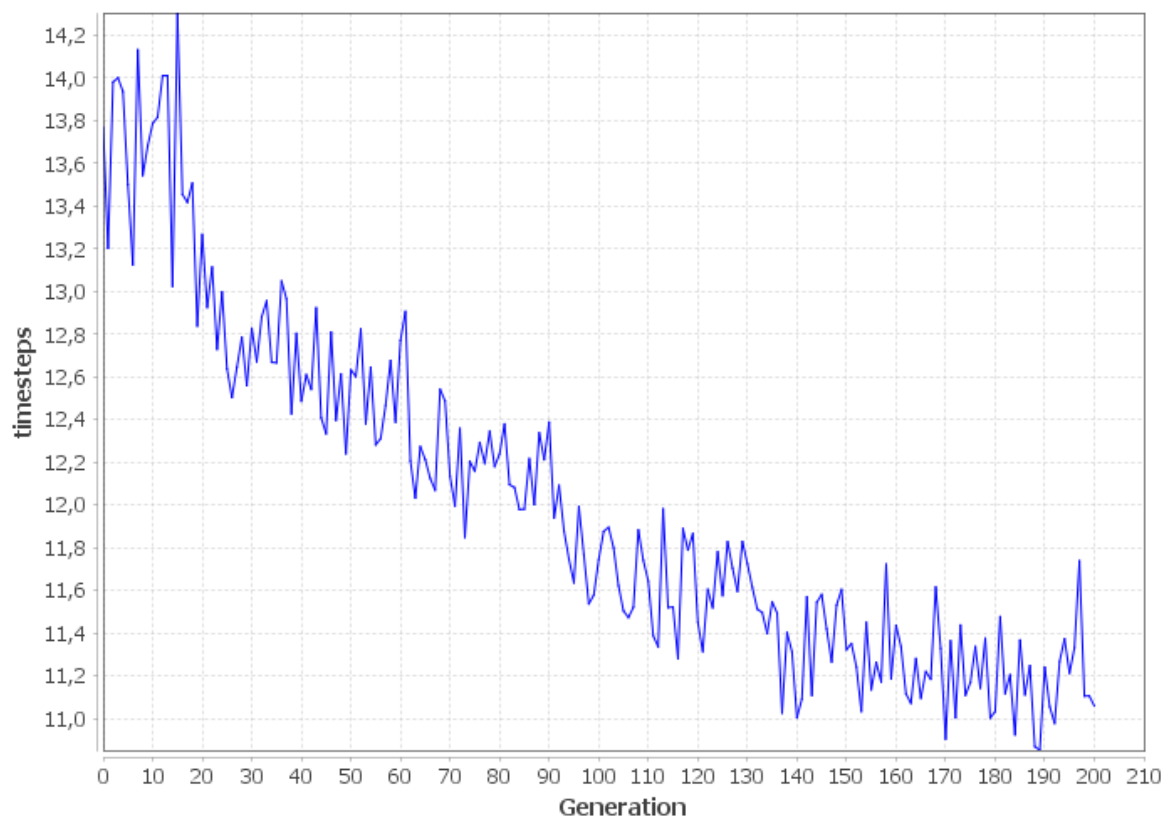


Figura 62: Evolução do número de passos de tempo da *DCT* na execução 7.

Apêndice C - Experimento da Seção 4.3

C.1 Gráficos de Evolução da Avaliação da *DCT* (Binomial)

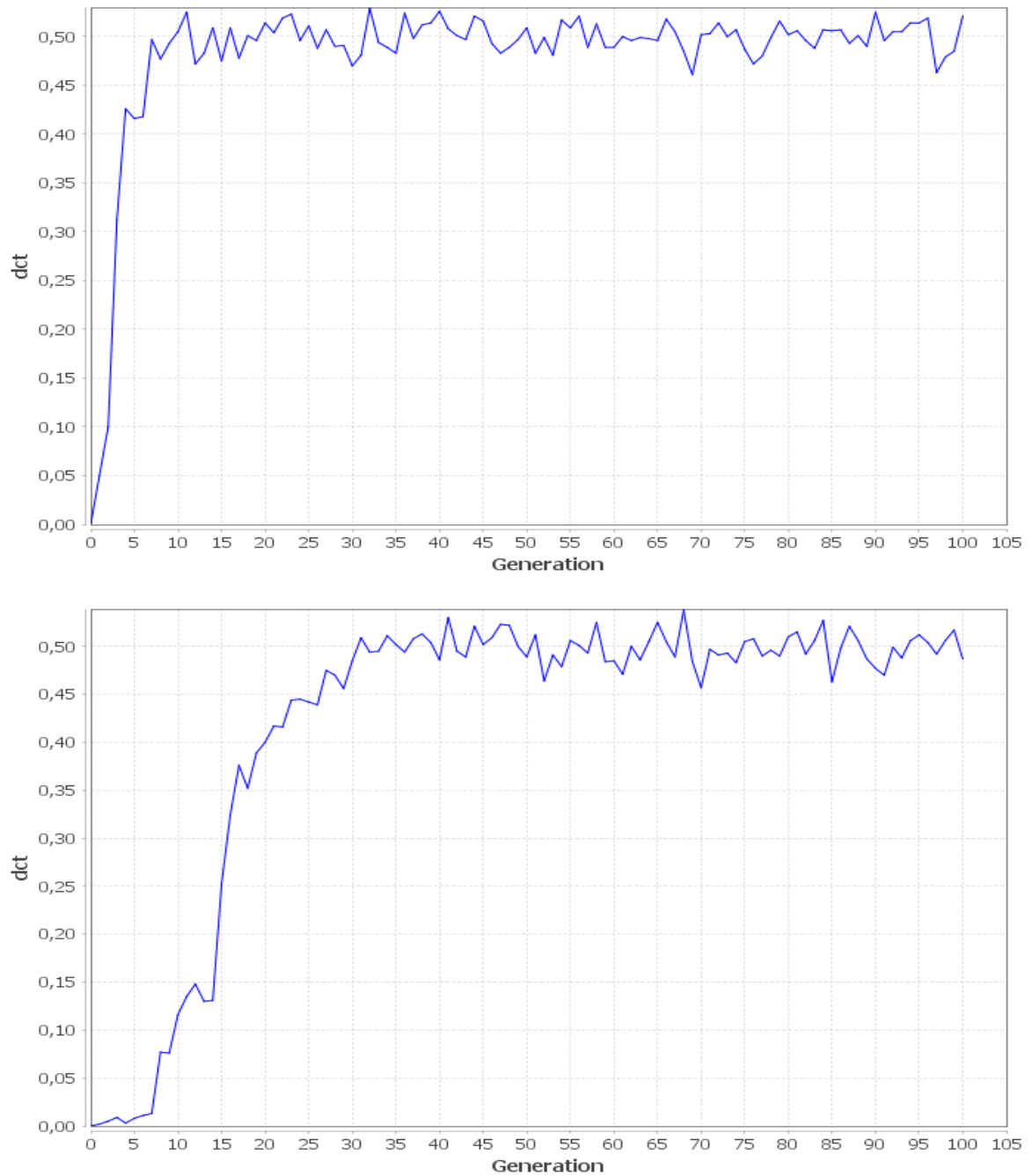


Figura 63: Evolução da avaliação da *DCT* (binomial) nas execuções 1 e 2.

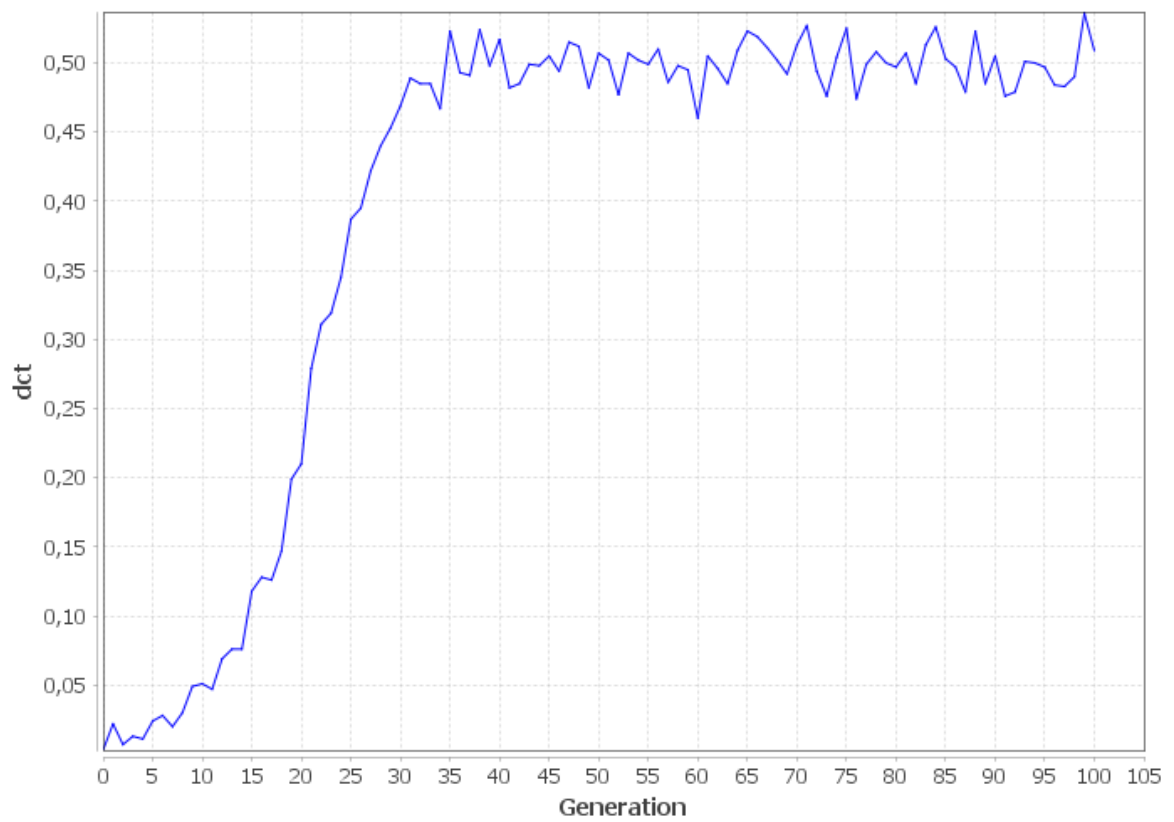
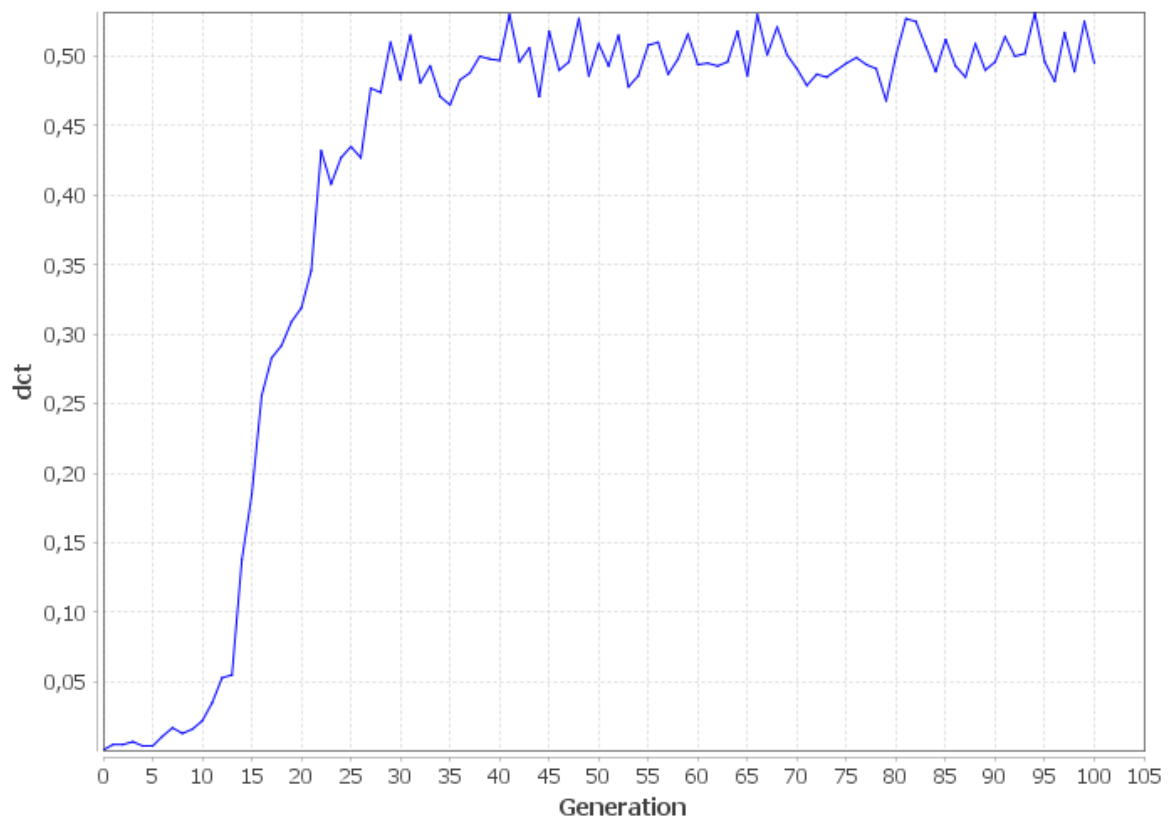


Figura 64: Evolução da avaliação da DCT (binomial) nas execuções 3 e 4.

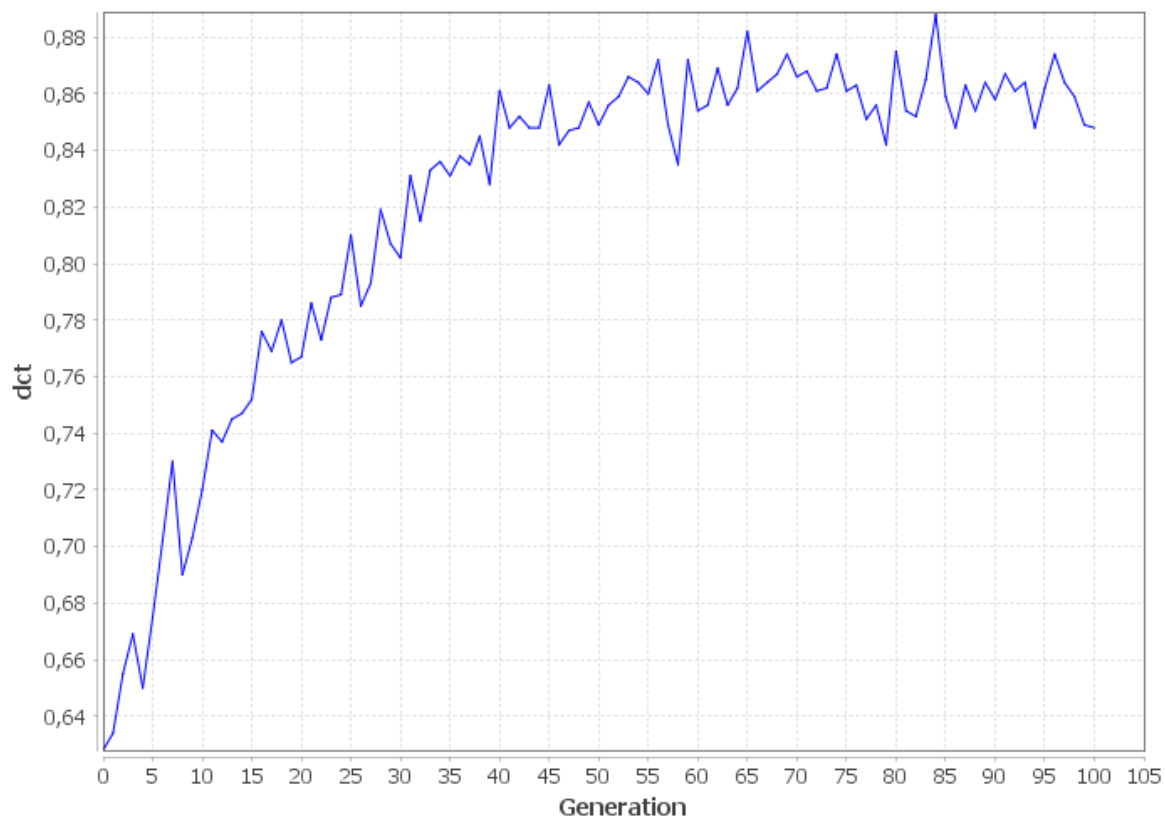
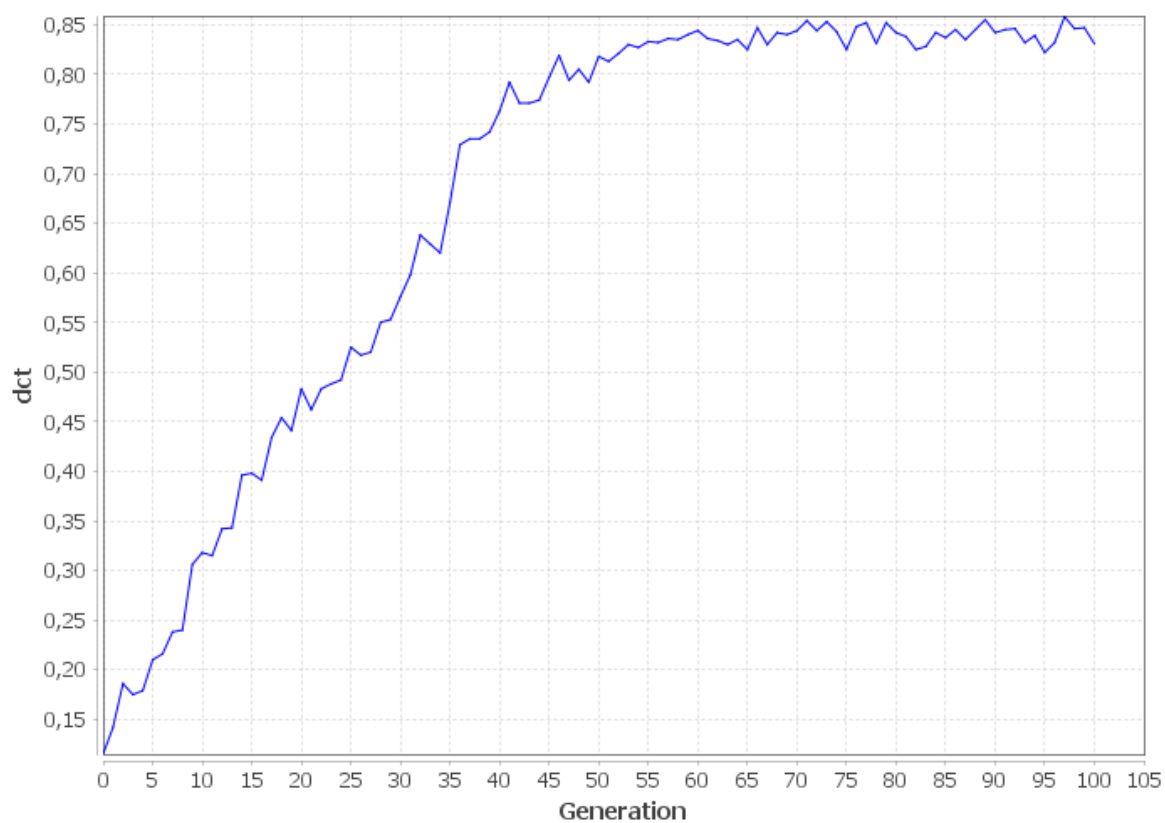


Figura 65: Evolução da avaliação da *DCT* (binomial) nas execuções 5 e 6.

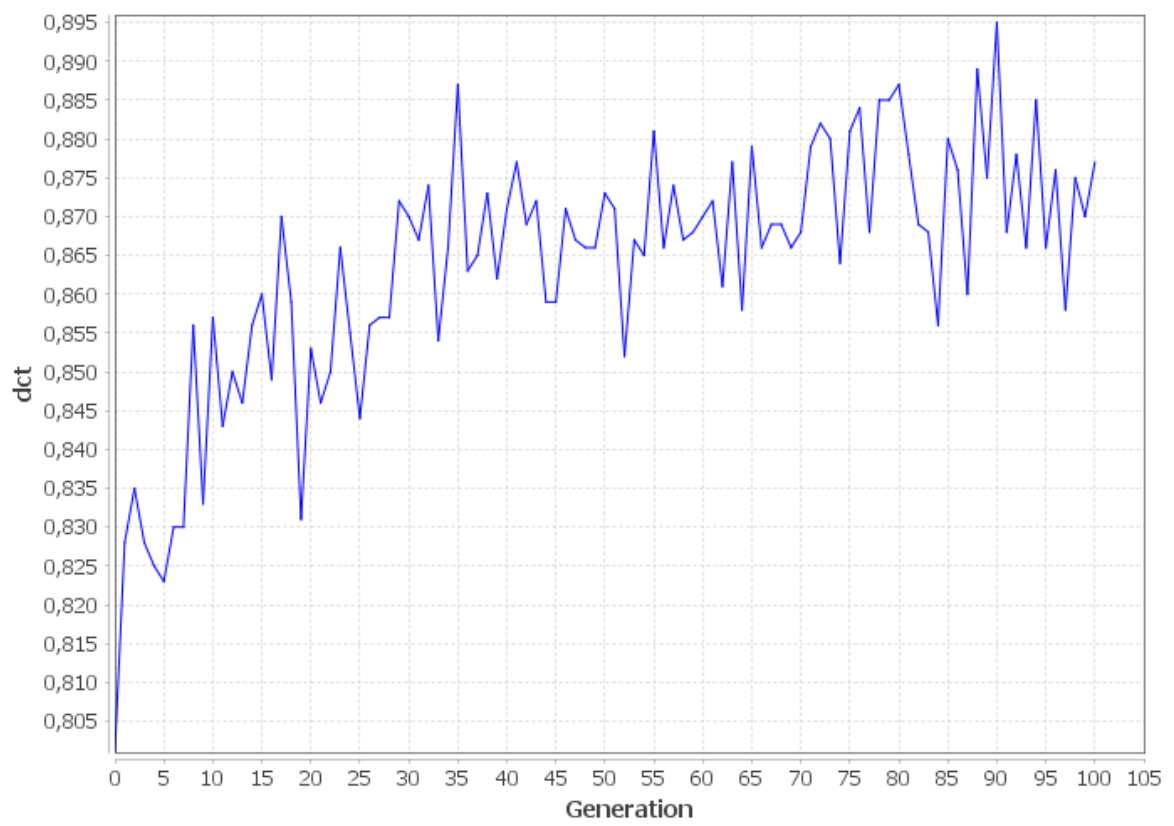


Figura 66: Evolução da avaliação da *DCT* (binomial) na execução 7.

C.2 Gráficos de Evolução da Avaliação da *DCT* (Nearly Bal.)



Figura 67: Evolução da avaliação da *DCT* (*nearly balanced*) nas execuções 1 e 2.

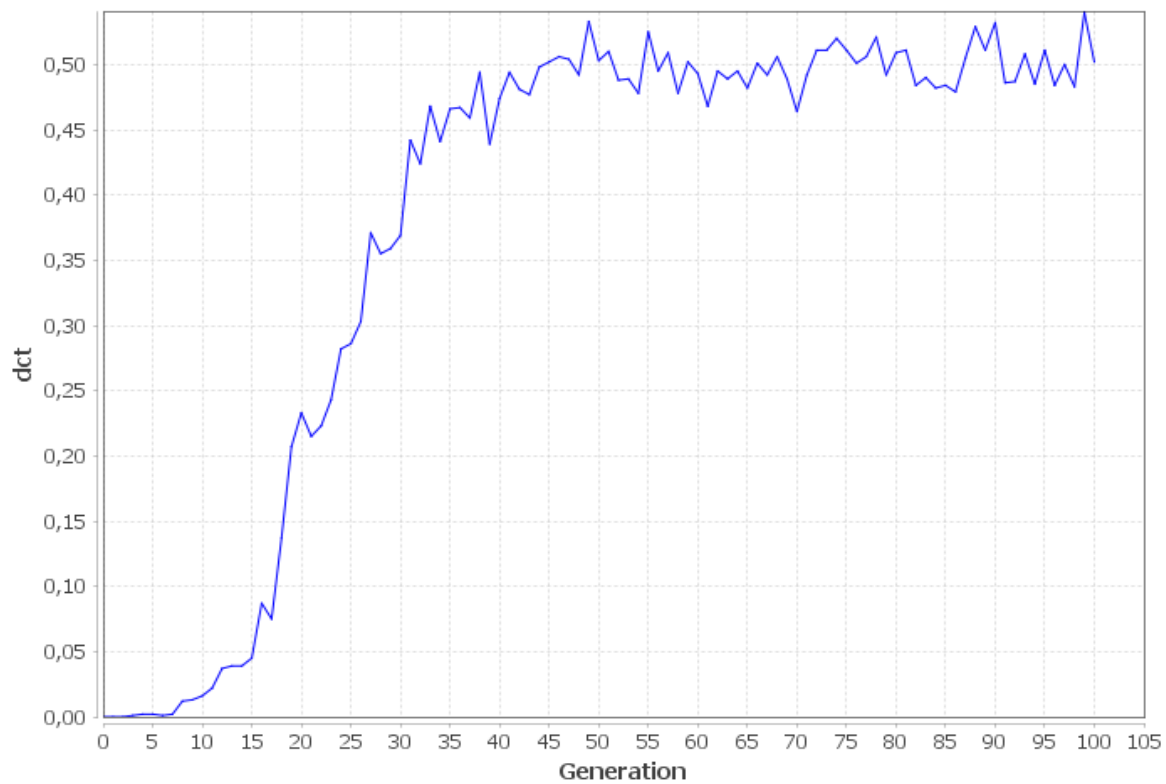
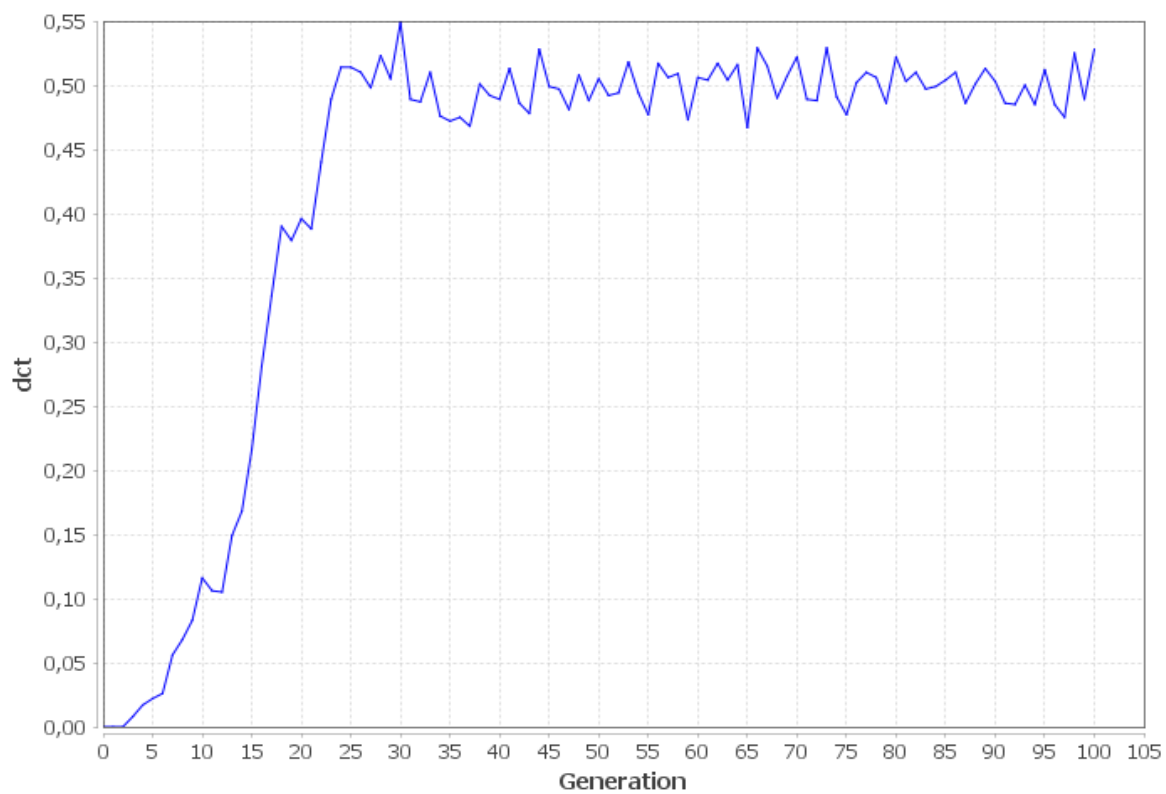


Figura 68: Evolução da avaliação da *DCT* (*nearly balanced*) nas execuções 3 e 4.

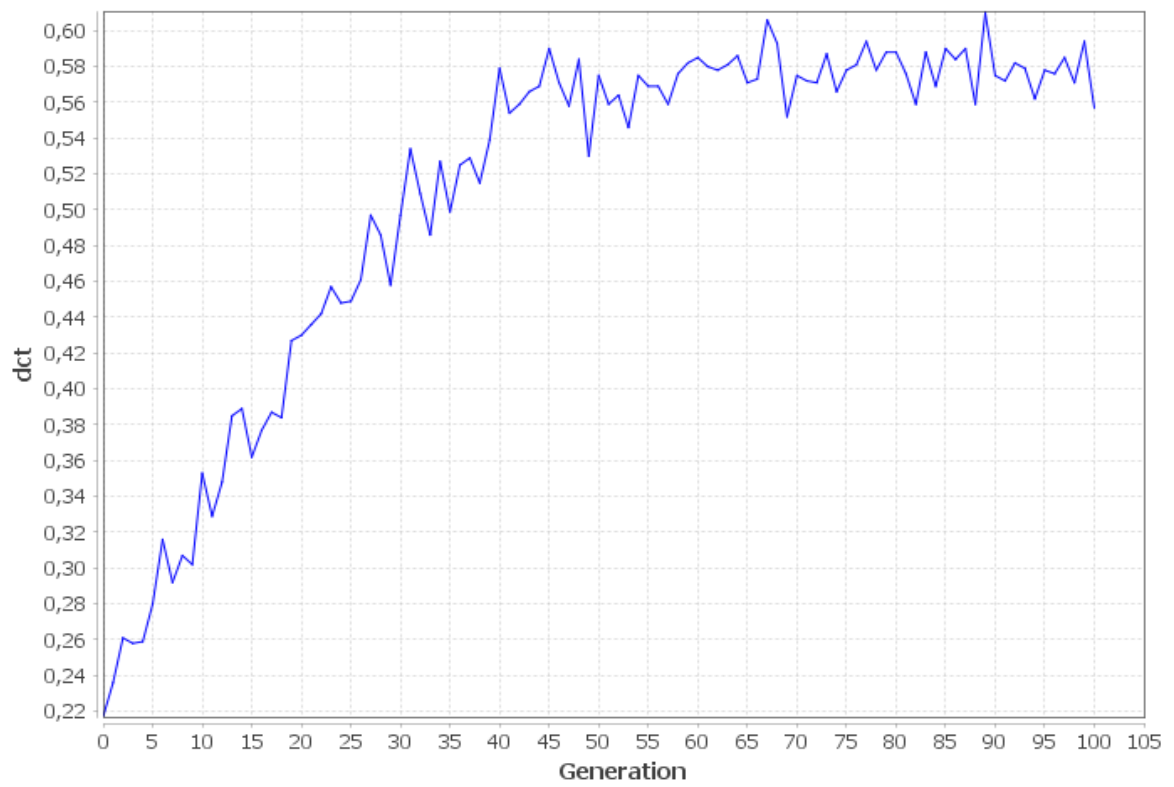
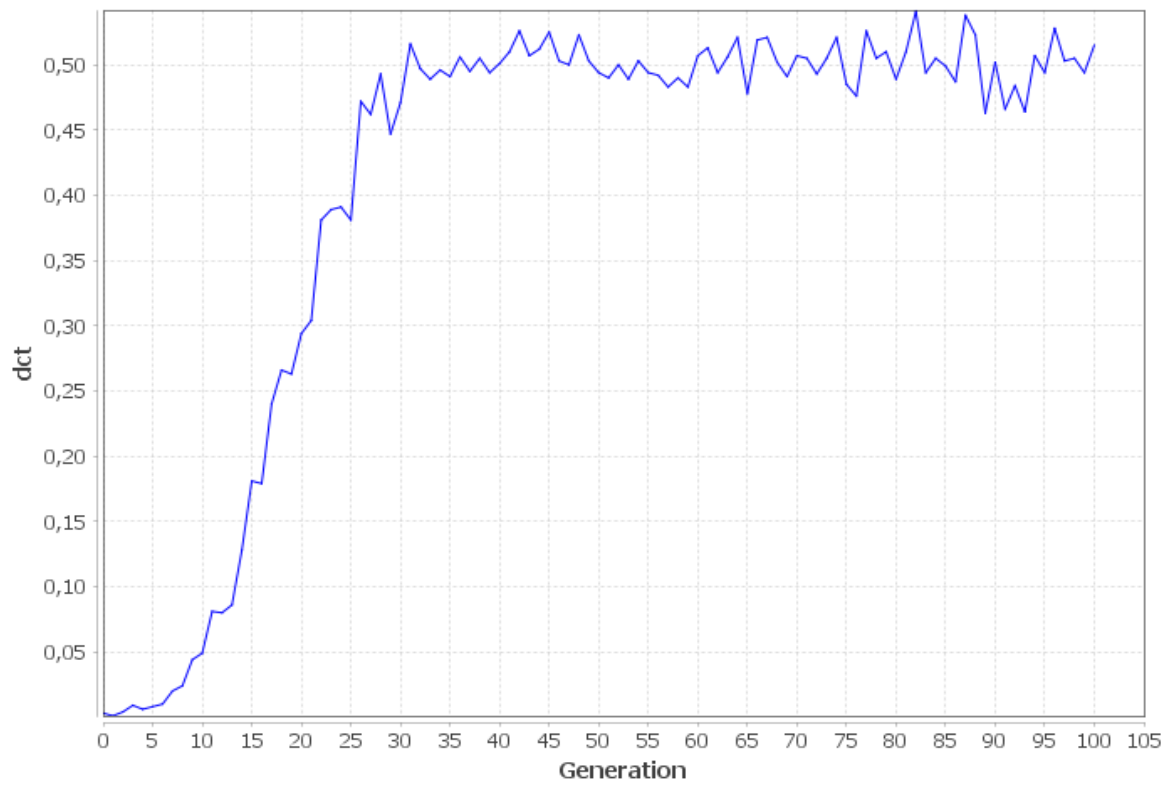


Figura 69: Evolução da avaliação da *DCT* (*nearly balanced*) nas execuções 5 e 6.

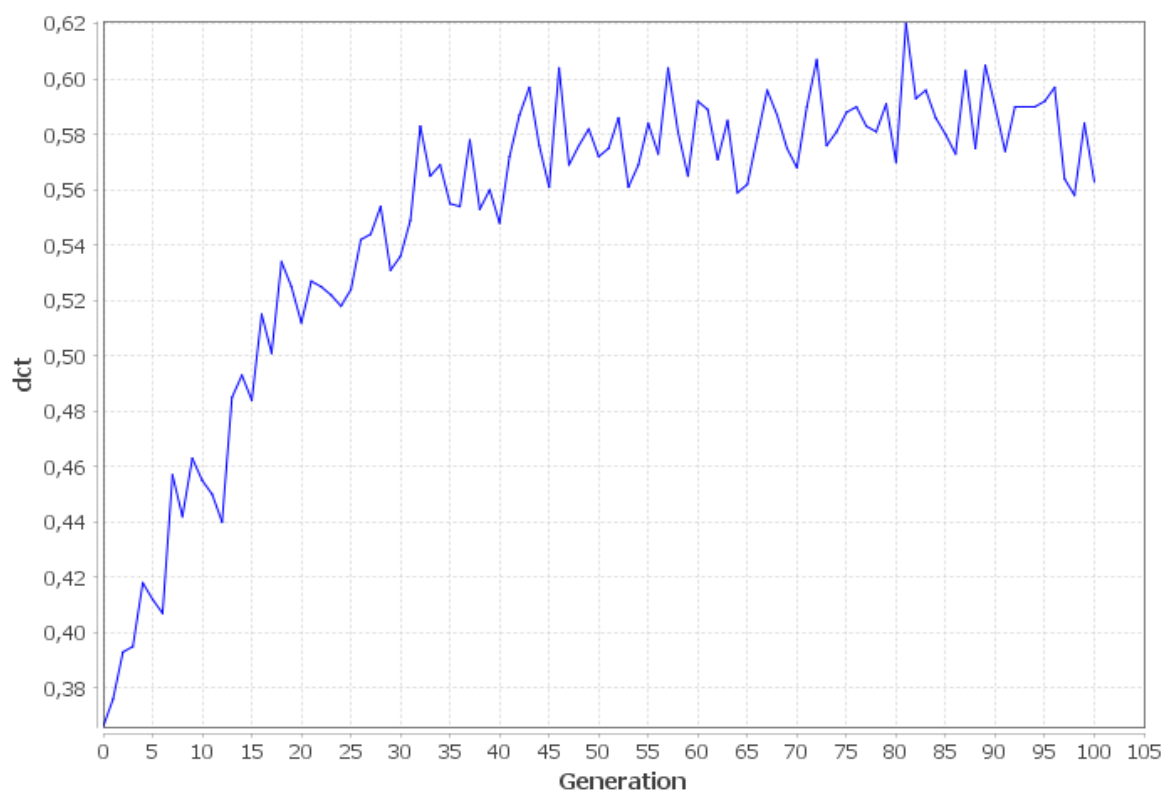


Figura 70: Evolução da avaliação da *DCT* (*nearly balanced*) na execução 7.

Referências Bibliográficas

- BARABASI, A.-L.; ALBERT, R. Emergence of scaling in random networks. *Science*, v. 286, n. 5439, p. 509–512, 1999.
- BRUSH, S. G. History of the lenz-ising model. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 39, p. 883–893, Oct 1967.
- CHIRA, C.; ANDREICA, A. Network topologies for cellular automata computation. *Emergence, Complexity and Computation*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 8, p. 271–281, 2014.
- CHOROMAŃSKI, K.; MATUSZAK, M.; MIEKISZ, J. Scale-free graph with preferential attachment and evolving internal vertex structure. *Journal of Statistical Physics*, v. 151, n. 6, p. 1175–1183, Jun 2013. ISSN 1572-9613.
- CLAUSET, A.; SHALIZI, C. R.; NEWMAN, M. E. J. Power-law distributions in empirical data. *SIAM Review*, SIAM, v. 51, n. 4, p. 661–703, 2009.
- DARABOS, C.; GIACOBINI, M.; TOMASSINI, M. Performance and robustness of cellular automata computation on irregular networks. *Advances in Complex Systems*, v. 10, n. supp01, p. 85–110, 2007.
- DE MATTOS, T.; DE OLIVEIRA, P. P. B. Guided evolutionary search for boolean networks in the density classification problem. In: DE LA PRIETA, F.; OMATU, S.; FERNÁNDEZ-CABALLERO, A. (Ed.). *Distributed Computing and Artificial Intelligence, 15th International Conference*. [S.l.]: Springer, 2018. (Advances in Intelligent Systems and Computing). ISSN 2194-5357.
- DE OLIVEIRA, P. P. B. On Density Determination With Cellular Automata: Results, Constructions and Directions. *Journal of Cellular Automata*, 9, n. 5-6, p. 357–385, 2014.
- ERDÖS, P.; RÉNYI, A. On random graphs. *Publicationes Mathematicae Debrecen*, v. 6, p. 290, 1959.
- FISHER, R. A. *The genetical theory of natural selection*. [S.l.]: Oxford University Press, 1930. 332 p.

- FOGEL, M. J.; OWENS, L. J.; WALSH, A. J. *Artificial Intelligence through Simulated Evolution*. [S.l.]: Wiley, 1966.
- GACS, P.; KURDYUMOV, G. L.; LEVIN, L. A. One-dimensional uniform arrays that wash out finite islands. *Problemy Peredachi Informatsii*, 14, p. 92–98, 1978.
- GODOY, A.; TABACOF, P.; VON ZUBEN, F. J. The role of the interaction network in the emergence of diversity of behavior. *PLoS ONE* 12, fev. 2017.
- GOLES, E.; MONTEALEGRE, P. On the complexity of two-dimensional signed majority cellular automata. *Theoretical Computer Science*, v. 559, p. 3–19, 2014.
- GOLES, E.; MONTEALEGRE, P.; PERROTD, K.; THEYSSIER, G. Computational complexity of threshold automata networks under different updating schemes. *Journal of Computer and System Sciences*, p. 1–32, 2017.
- HEXMOOR, H. *Computational Network Science - An Algorithmic Approach*. 1. ed. [S.l.]: Elsevier, Inc., 2015.
- HOLLAND, J. *Adaptation in natural and artificial systems*. The University of Michigan Press, Ann Arbor, 1975.
- HUMPHRIES, M. D.; GURNEY, K. Network ‘small-world-ness’: A quantitative method for determining canonical network equivalence. *PLoS ONE*, v. 3, n. 4, 2008.
- HUMPHRIES, M. D.; GURNEY, K.; TJ., P. The brainstem reticular formation is a small-world, not scale-free network. *Proc R Soc Lond*, n. 273, p. 503–511, 2006.
- JONG, K. A. D. *Evolutionary computation - a unified approach*. [S.l.]: MIT Press, 2006. I-IX, 1-256 p. ISBN 978-0-262-04194-2.
- KAUFFMAN, S. A. Homeostasis and differentiation in random genetic control networks. *Nature*, n. 224, p. 437–67, 1969.
- KRAPIVSKY, P. L.; REDNER, S. Dynamics of majority rule in two-state interacting spin systems. *The American Physical Society*, jun. 2003.
- LAND, M.; BELEW, R. No two-state CA for density classification exists. *Physical Review Letters*, 74, n. 5148-51, 1995.

- MAKOWIEC, D. Cellular automata with majority rule on evolving network. Springer, v. 3305, p. 141–150, 2004.
- NEWMAN, M. The structure and function of complex networks. *SIAM Review*, v. 45, n. 2, p. 167–256, 2003.
- SHMULEVICH, I.; DOUGHERTY, E. R. *Probabilistic Boolean Networks - The Modeling and Control of Gene Regulatory Networks*. [S.l.]: SIAM, 2010. ISBN 978-0-89871-692-4.
- SHUANG, L. Confidence interval estimation for coefficient of variation. *Thesis, Georgia State University*, 2012.
- TELESFORD, Q. K.; JOYCE, K. E.; HAYASAKA, S.; BURDETTE, J. H.; LAURIENTI, P. J. The ubiquity of small-world networks. *Brain Connectivity*, School of Biomedical Engineering and Sciences, Virginia Tech-Wake Forest University, v. 1, p. 367–375, 2011.
- TOMASSINI, M.; GIACOBINI, M.; DARABOS, C. Evolution and dynamics of small-world cellular automata. *Complex Systems*, v. 15, n. 4, 2005.
- WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. Collective dynamics of 'small-world' networks. *Nature*, v. 393, p. 440–442, April 1998.
- WOLFRAM, S. Universality and Complexity in Cellular Automata. *Physica D*, Elsevier Science BV, 10, n. 1-2, 1984.